

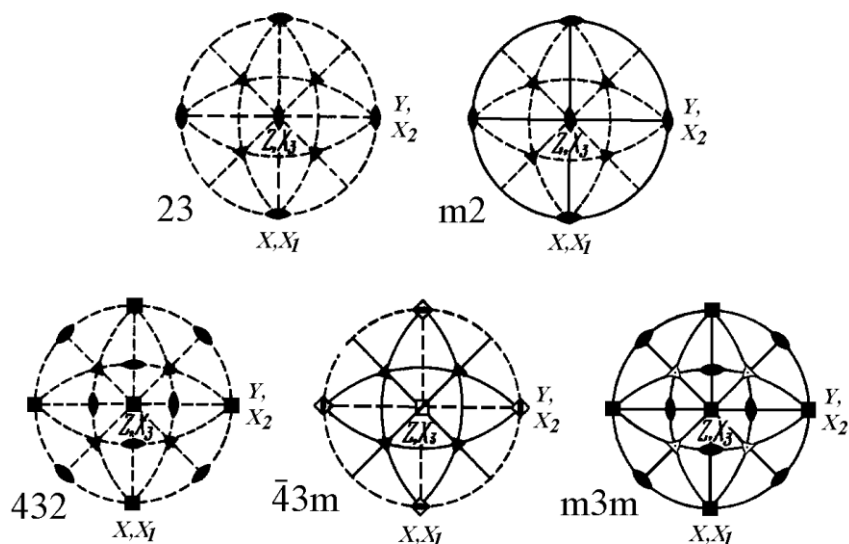
Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники

Давыдов В.Н.

МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

Часть 1

Основы кристаллографии и кристаллофизики



ТОМСК 2012

Министерство образования и науки Российской Федерации

**ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ
УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ**

ДАВЫДОВ В.Н.

**МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ
ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ**

**ЧАСТЬ 1
ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ
И КРИСТАЛЛОФИЗИКИ**

*Учебное пособие
для студентов, обучающихся по очной
форме специальности 210105.65*

ТОМСК - 2012

Давыдов Валерий Николаевич,
профессор кафедры электронных приборов ТУСУР

МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ. Учебное пособие.
Часть 1 «Основы кристаллографии и кристаллофизики».. – Томск, ТУСУР, 2012. –
132 с.

В первой части учебного пособия изложены основы анализа структуры и физических свойств кристаллов с позиций теории симметрии, принятых в современной кристаллографии и кристаллофизике. В нем также описан математический аппарат, используемый для описания физических явлений в кристаллах, который базируется на тензорном исчислении и аналитической геометрии. Изложение материала иллюстрируется физическими примерами и аналогиями. Выбранная форма изложения материала пособия направлена на формирование у студентов целостного методологического подхода к описанию физических явлений в кристаллах, позволяющего выявлять сущность явления, предсказывать новые физические явления, перспективные к применению в электронном приборостроении, предсказывать его основные свойства. Исчисления. Изложение материала пособия ориентировано на студентов технических вузов и не требует специальных знаний кроме основ высшей математики и физики, даваемых на первых курсах вузов.

На основании экспертизы УМК по специальности 210105.65 «Электронные приборы и устройства» комиссия Учебно-методического объединения по образованию в области автоматики, электроники, микроэлектроники и радиотехники присвоила данному учебному пособию гриф «Рекомендуется для межвузовского использования».

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ.....	6
2. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О МАТЕРИАЛАХ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ.....	8
2.1. Классификация материалов по свойствам.....	8
2.2. Виды химической связи.....	10
2.3. Классификация материалов по строению.....	14

ЧАСТЬ I

«ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОФИЗИКИ»

3. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ	17
3.1. Структура кристалла и его решётка.....	17
3.2. Кристаллографическая система координат	18
3.3. Взаимный векторный базис и обратная решётка.....	19
3.4. Символы узлов, направлений и плоскостей в кристаллах. Индексы Миллера.....	25
3.4.1. Символ и индексы Миллера кристаллографического направления.....	25
3.4.2. Символ и индексы Миллера кристаллографической плоскости.....	26
3.5. Теория симметрии кристаллов	30
3.5.1. Элементы точечной симметрии кристаллов	30
3.5.2. Свойства элементов точечной симметрии	35
3.5.3. Матричное представление элементов симметрии.....	36

3.6. Стереографическая проекция кристаллов	38
3.7. Кристаллографические категории, системы и сингонии.....	41
3.8. Точечные группы симметрии кристаллов.	
Символики точечных групп.....	44
3.9. Составление и расшифровка стереографической проекции кристалла.....	48
3.10. Вывод групп точечной симметрии кристаллов	50
3.11. Пространственная симметрия структуры кристаллов.....	53
3.12. Решётки Бравэ. Пространственная группа симметрии кристалла	55
4. ЭЛЕМЕНТЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО АППАРАТА.....	58
4.1. Кристаллофизическая система координат	58
4.2. Предельные группы симметрии (группы Кюри).	
Принципы кристаллофизики.....	59
4.3. Тензоры первого ранга	65
4.3.1. Полярные векторы.....	65
4.3.2 Аксиальные векторы.....	66
4.4. Тензоры второго ранга	70
4.4.1. Основные положения теории	70
4.4.2. Введение тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики.....	73
4.4.3. Собственные векторы и собственные значения симметричного тензора второго ранга	77
4.4.4. Нормальные и тангенциальные составляющие тензора второго ранга.....	81
4.4.5. Указательная и характеристическая поверхности тензора второго ранга.....	84
4.5. Тензоры высших рангов	87

4.5.1. Введение тензоров высших рангов в задачах кристаллофизики.....	87
4.5.2. Внутренняя симметрия тензоров высших рангов. Соотношения дуальности	95
4.5.3. Внешняя симметрия тензоров высших рангов.....	102
4.5.4. Метод прямой проверки в декартовых координатах.....	105
4.5.5. Метод прямой проверки в циклических координатах. Теорема Германа.....	110
5. ЛИТЕРАТУРА.....	115
6. ПРИЛОЖЕНИЯ	116
Таблица 1. Стандартные установки кристаллографической системы координат	117
Таблица 2. Стереографические проекции кристаллов различной точечной симметрии	118
Таблица 3. Распределение решеток Бравэ по системам	123

1. ВВЕДЕНИЕ

Современный научно-технический прогресс неразрывно связан с разработкой и применением новых материалов. Именно материалы стали основой при решении многих инженерных задач по созданию сложнейшей радиоэлектронной аппаратуры. По этой причине важно знать основные свойства материалов электронной техники, их возможные сочетания.

В настоящее время номенклатура материалов, используемых в электронном приборостроении, насчитывает несколько тысяч наименований, и этот список продолжает увеличиваться. Поэтому перед началом решения задачи по созданию нового электронного прибора или устройства необходим выбор материалов, предполагаемых для использования в разработке. Как правило, отбор по одному параметру не дает удовлетворительного результата: удовлетворяя поставленным требованиям по одним свойствам, эти материалы могут оказаться неприменимы по другим. Поэтому правильный выбор материалов проводится по ряду параметру и свойств и, значит, разработчикам электронной аппаратуры необходимо знать основной набор уже имеющихся материалов, а также закономерности их изменения в различных условиях эксплуатации. Кроме знания имеющихся материалов зачастую приходится синтезировать новые материалы с требуемыми свойствами. Реализация этой задачи возможна лишь при установлении тесной связи между микроскопическим строением вещества и его макроскопическими свойствами.

Среди материалов электронной техники особое место в электронном приборостроении занимают кристаллы. Это связано с тем, что обладая различными свойствами, кристаллы дают возможность построения приборов по функциональному преобразованию электрических сигналов за счет использования их физических свойств. К таким кристаллам относятся

полупроводники различного химического состава, пьезоэлектрики, оптически активные кристаллы, пироэлектрики, сегнетоэлектрики и т.д. Широкое применение кристаллов в электронике ставит задачу подготовки специалистов, способных не только грамотно работать с уже имеющейся аппаратурой, но и разрабатывать приборы и устройства с более совершенными характеристиками и более широкими функциональными возможностями. Это предполагает наличие у специалистов по электронной технике глубоких фундаментальных знаний по различным областям твердотельной электроники, в основе которых лежат кристаллография, кристаллофизика и физика твердого тела.

Учебное пособие состоит из двух частей. Первая часть пособия «Основы кристаллографии и кристаллофизики» посвящена основным способам описания структуры элементарной ячейки, принципы формирования точечных групп симметрии кристаллов, с позиции теории симметрии описана структура кристаллов, а также изложены основные положения математического аппарата кристаллофизики – тензорного исчисления. При этом для понимания излагаемого материала дается физическая интерпретация каждой из рассматриваемых операций. Рассмотрены свойства точечных элементов симметрии, принципы составления стереографической проекции и международного символа точечной группы. Симметрия физических свойств кристаллов излагается с применением фундаментальных принципов кристаллофизики.

Во второй части пособия «Основы кристаллографии и физики твердого тела» сформулированы общие правила определения симметричных свойств тензора и его ранга, описывающего физические свойства кристаллов, показаны способы математического описания и предсказания физических явлений в кристаллических веществах с применением элементов тензорного исчисления. Здесь же приведено описание конкретных физических свойств

кристалла, описываемых тензорами первого, второго, третьего и четвертого рангов, которые используются или могут быть использованы в электронном приборостроении. В последних главах второй части учебного пособия рассмотрены свойства жидких кристаллов и сверхпроводников с позиций их использования в электронном приборостроении.

2. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О МАТЕРИАЛАХ ЭЛЕКТРОНОЙ ТЕХНИКИ

2.1. Классификация материалов по свойствам

Материалы, используемые в электронной технике, подразделяют на электротехнические, конструкционные и материалы специального назначения.

Электротехническими называют материалы, характеризующиеся определенными свойствами по отношению к электромагнитному полю и применяемые в технике с учетом этих свойств. Практически различные материалы подвергаются воздействиям как отдельно электрических или магнитных полей, так и их совокупности. По поведению в магнитном поле электротехнические материалы подразделяют на *сильномагнитные* (магнетики) и *слабوماгнитные*. Первые нашли особенно широкое применение в технике благодаря их магнитным свойствам. По поведению в электрическом поле материалы подразделяют на проводниковые, полупроводниковые и диэлектрические.

Большинство электротехнических материалов можно отнести к слабوماгнитным или практически немагнитным. Среди магнетиков различают проводящие, полупроводящие и практически непроводящие магнетики, что определяет частотный диапазон их применения.

Проводниковыми называют материалы, основным электрическим свойством которых является сильно выраженная электропроводность. Их применение в технике обусловлено в основном этим свойством, определяющим высокую удельную электрическую проводимость при нормальной температуре.

Полупроводниковыми называют материалы, являющиеся по удельной проводимости промежуточными между проводниковыми и диэлектрическими материалами и отличительным свойством которых является сильная зависимость удельной проводимости от концентрации и вида примесей или различных дефектов, а также в большинстве случаев от внешних энергетических воздействий (температуры, освещенности и т. п.).

Диэлектрическими называют материалы, основным электрическим свойством которых является способность к поляризации и в которых возможно существование электростатического поля. Реальный (технический) диэлектрик тем ближе к идеальному, чем меньше его удельная проводимость и чем слабее у него выражены механизмы поляризации, связанные с рассеиванием электрической энергии и выделением теплоты.

При применении диэлектриков - одного из наиболее обширных классов электротехнических материалов - четко определилась необходимость использования как пассивных, так и активных свойств этих материалов.

Пассивные свойства диэлектрических материалов используются, когда их применяют в качестве электроизоляционных материалов и диэлектриков конденсаторов обычных типов. Электроизоляционными материалами называют диэлектрики, которые не допускают утечки электрических зарядов, т. е. с их помощью отделяют электрические цепи друг от друга или токоведущие части устройств, приборов и аппаратов от проводящих, но не токоведущих частей (от корпуса, от земли). В этих случаях диэлектрическая проницаемость материала не играет особой роли или она должна быть возможно меньшей,

чтобы не вносить в схемы паразитных емкостей. Если материал используется в качестве диэлектрика конденсатора определенной емкости и наименьших размеров, то при прочих равных условиях желательно, чтобы этот материал имел большую диэлектрическую проницаемость.

Активными (управляемыми) диэлектриками являются сегнетоэлектрики, пьезоэлектрики, пироэлектрики, электролюминофоры, материалы для излучателей и затворов в лазерной технике, электреты и другие.

Проводники. Условно к проводникам относят материалы с удельным электрическим сопротивлением $\rho < 10^{-5}$ Ом·м, а к диэлектрикам - материалы, у которых $\rho > 10^8$ Ом·м. При этом надо заметить, что удельное сопротивление хороших проводников может составлять всего 10^{-9} Ом·м, а у лучших диэлектриков превосходить 10^{16} Ом·м. Удельное сопротивление полупроводников в зависимости от строения и состава материалов, а также от условий их эксплуатации может изменяться в пределах $(10^{-5} \div 10^8)$ Ом·м. Хорошими проводниками электрического тока являются металлы. Из всех химических элементов лишь двадцать пять являются неметаллами, причем двенадцать элементов могут проявлять полупроводниковые свойства. Но кроме элементарных веществ существуют тысячи химических соединений, сплавов или композиций со свойствами проводников, полупроводников или диэлектриков. Четкую границу между значениями удельного сопротивления различных классов материалов провести сложно. Например, многие полупроводники при низких температурах ведут себя подобно диэлектрикам. В то же время диэлектрики при сильном нагревании могут проявлять свойства полупроводников. Качественное различие состоит в том, что для металлов проводящее состояние является основным, а для полупроводников и диэлектриков - возбужденным.

Развитие электронной техники потребовало создания материалов, в которых специфические высокочастотные свойства сочетаются с необходимыми физико-механическими параметрами. Такие материалы называют *высокочастотными*.

Для понимания электрических, магнитных и механических свойств материалов, а также причин старения материалов нужны знания их химического и фазового состава, атомной структуры и структурных дефектов.

2.2. Виды химической связи

Основными элементарными частицами, из которых построены все известные нам вещества, являются протоны, нейтроны и электроны.

Спектры уединенных атомов характеризуются определенными линиями и называются линейчатыми. Дискретная (линейчатая) природа энергетического спектра изолированных атомов подтверждается экспериментами по исследованию поглощения и излучения паров различных веществ.

Атомы, ионы, молекулы. Газы, жидкие и твердые тела могут состоять из атомов, молекул или ионов. Размеры атомов порядка одного или нескольких ангстрем (10^{-10} м). При сближении атомов до расстояния порядка нескольких ангстрем между ними проявляются силы взаимодействия. В зависимости от характера движения электронов в соседних атомах эти силы могут быть силами отталкивания или притяжения. В последнем случае атомы могут соединяться с выделением энергии, образуя устойчивые химические соединения. Электроны внутренних полностью заполненных оболочек не участвуют в образовании химических связей. Химические свойства атомов определяются строением внешней, не

полностью заполненной электронами оболочки. Электроны, находящиеся во внешней оболочке, называют валентными.

Различают несколько видов химической связи.

Гомеополярная (ковалентная) связь. При этой связи у веществ объединение атомов в молекулу достигается за счет электронов, которые становятся общими для пар атомов. Плотность отрицательно заряженного электронного облака между положительно заряженными ядрами получается наибольшей. Пример - молекула H_2 . Такую связь называют гомеополярной или ковалентной. Перекрывание электронных облаков, приводящее к обобществлению электронов, не сводится к простому наложению друг на друга двух электронных орбит, а сопровождается перераспределением электронной плотности и изменением энергии системы. При обобществлении электронов происходит втягивание электронных облаков в пространство между ядрами. Появление состояния с повышенной плотностью электронного заряда в межъядерном пространстве и приводит к возникновению сил притяжения.

В основе гомеополярной связи лежит обменное взаимодействие или обменный эффект, обусловленный обменом атомов электронами и имеющий квантовую природу. Силы такого взаимодействия называют обменными силами, а их энергия - обменной энергией. Важнейшей особенностью обменных сил является их сильная зависимость от направления спинов электронов, осуществляющих связь между взаимодействующими атомами. Связь будет сильной только в том случае, если спины антипараллельны. Гомеополярные связи определенным образом ориентированы в пространстве и образуются только между ближайшими соседними атомами.

Молекулы с гомеополярной связью бывают неполярными или полярными (дипольными) в соответствии с симметричным или асимметричным строением. Молекулы, в которых центры положительных и отрицательных зарядов совпадают, называют *неполярными*. Если же в молекулах центры

противоположных по знаку зарядов не совпадают и находятся на некотором расстоянии друг от друга, то такие молекулы называют *полярными* или *дипольными*.

Примерами подобных веществ являются алмаз, кремний, германий, карбид кремния (SiC) и другие. В этих веществах каждый атом образует четыре связи со своими ближайшими соседями. Ковалентная связь характеризуется высокой прочностью. Подтверждением этому является высокая твердость и высокая температура плавления таких веществ как алмаз, карбид кремния.

Гетерополярная (ионная) связь возникает вследствие перехода валентных электронов от металлического атома к металлоидному и электростатического притяжения разноименно заряженных ионов. Этот вид химической связи реализуется в ионных кристаллах. Типичным примером ионных кристаллов являются галоидные соли щелочных металлов. Ионные решетки характеризуются высоким координационным числом, показывающим количество ближайших ионов противоположного знака. В ионном кристалле комбинации противоположно заряженных ионов нельзя отождествлять с индивидуальными молекулами вследствие регулярного чередования в узлах решетки ионов различного сорта. Правильнее считать монокристалл ионного соединения одной гигантской молекулой, в которой каждый ион испытывает сильное воздействие со стороны соседних частиц.

Металлическая связь существует в системах, построенных из положительных атомных остовов, находящихся в среде свободных коллективизированных электронов. Притяжение между положительными атомными остовами и электронами обуславливает целостность металла. Металлическую связь можно рассматривать до некоторой степени как ковалентную связь, поскольку, в их основе лежит обобществление внешних валентных электронов. Специфика металлической связи состоит в том, что в обобществлении электронов участвуют все атомы кристалла,

и обобществленные электроны не локализируются вблизи своих атомов, а свободно перемещаются внутри всей решетки, образуя «электронный газ». Не имея локализованных связей, металлические кристаллы (в отличие от ионных) не разрушаются при изменении положений атомов, т. е. им свойственна пластичность при деформациях. Благодаря наличию свободных электронов металлы обладают высокими электро- и теплопроводностью.

Молекулярная связь (связь Ван-дер-Ваальса) наблюдается у ряда веществ между молекулами с ковалентным характером внутримолекулярного взаимодействия. Наличие межмолекулярного притяжения в этом случае возможно при согласованном движении валентных электронов в соседних молекулах. В любой момент времени электроны должны быть максимально удалены друг от друга и максимально приближены к положительным зарядам (ядрам). Тогда силы притяжения валентных электронов ядром соседней молекулы оказываются сильнее сил взаимного отталкивания электронов оболочек этих молекул. Подобное притяжение между флуктуирующими электрическими диполями получило название дисперсионного взаимодействия. Связь Ван-дер-Ваальса является наиболее универсальной, она возникает между любыми частицами, но это наиболее слабая связь, энергия ее примерно на два порядка ниже энергии ионной и ковалентной связей. Поскольку дисперсионное взаимодействие оказывается очень слабым, молекулярные связи четко проявляются лишь в тех случаях, когда они возникают между атомами или молекулами. Молекулярная связь легко разрушается тепловым движением. Поэтому молекулярные кристаллы механически непрочные.

2.3. Классификация материалов по строению

Кристаллы и аморфные тела. В отличие от жидкостей, твердые тела обладают упругостью формы. Прикладывая к твердым телам внешние силы, можно изменить его форму тем сильнее, чем больше приложенные усилия. При этом если не перейден некоторый уровень деформации, то при снятии нагрузки твердое тело принимает свою первоначальную форму. Эти качественные различия жидкого и твердого состояний вещества обусловлены различием в их строении и в характере теплового движения молекул. В кристаллическом состоянии твердого тела атомы находятся в определенных положениях равновесия. Под действием внешних сил атомы смещаются из этих положений и при снятии нагрузки возвращаются в них обратно, если эти смещения не превышают характерной для данного тела величины. Этим и обусловлена упругость формы твердых тел. В твердом кристалле атомы располагаются в определенном порядке во всем теле. Атом, находящийся в n -ном слое от центрального атома, всегда находится от него на расстоянии, точно в 2 раза меньшем, чем атом $2n$ -го слоя. Атомы располагаются в узлах правильной пространственной сетки, так называемой кристаллической решетки. Для любого направления в пространстве, проходящего через центры атомов, расстояния между центрами двух соседних атомов остаются неизменными вдоль всей прямой (но отличаются для разных прямых). В соответствии с этим и многообразные физические свойства — упругие, механические, тепловые, электрические, оптические и другие свойства кристаллов будут различными по различным направлениям.

Кристаллические тела также могут быть подразделены на монокристаллы и поликристаллы. Монокристалл - твердое тело, частицы которого образуют единую кристаллическую решетку. Определенный порядок в расположении частиц распространяется на весь объем монокристалла. Упорядоченное внутреннее расположение частиц в монокристалле приводит к тому, что и его внешняя форма является

правильной. Углы между внешними гранями монокристалла оказываются постоянными. К монокристаллам относятся природные кристаллы (кварц, алмаз, турмалин), крупинки соли, сахара.

Поликристалл - твердое тело, состоящее из беспорядочно ориентированных монокристаллов.

Третьим видом твердого тела являются композиты. Атомы в композитах располагаются трехмерно упорядоченно в определенной области пространства, но этот порядок не повторяется с регулярной периодичностью. Композиты состоят из различных, связанных друг с другом материалов.

Стекла и другие аморфные тела. Не все твердые тела имеют кристаллическую структуру, хотя кристаллическое состояние большинства твердых тел является естественным, потому что энергия при упорядоченном расположении атомов меньше, чем в случае их нерегулярного расположения, а любая система стремится перейти в состояние с минимальной свободной энергией. Однако атомы не всегда имеют возможность располагаться упорядоченно в процессе затвердевания. Препятствие этому - резкое уменьшение скорости диффузии атомов при охлаждении среды. Твердые тела, которые характеризуются случайным хаотичным расположением частиц, называют аморфными. В отличие от кристаллов аморфные тела изотропны по свойствам, не имеют определенной температуры плавления и характеризуются достаточно широким температурным интервалом размягчения. Наглядным примером аморфных веществ могут служить стекла и многие пластики. В стеклах при отсутствии периодичности в строении можно наблюдать определенный *ближний порядок*, т.е. закономерное расположение ближайших соседей относительно каждого атома. Стеклообразное состояние можно рассматривать как состояние сильно переохлажденной жидкости, т. е. жидкости с высокой вязкостью. Высокая вязкость ограничивает диффузионную активность атомов и препятствует образованию

кристаллической фазы. Однако такое состояние термодинамически неустойчиво. Поэтому при отжиге может происходить «расстекловывание» материала, т. е. переход в более устойчивое кристаллическое состояние.

ЧАСТЬ 1

«ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОФИЗИКИ»

3. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

3.1 Структура кристалла и его решетка

Кристаллография - это область науки, в задачу которой входит описание и объяснение структуры кристаллов на основе законов симметрии и пространственных соотношений расстояний между атомами.

Известно, что частицы, из которых сложены кристаллы, расположены в пространстве закономерно и симметрично в виде правильных сеток и решеток. Вследствие этого симметричны и физические свойства кристаллов. Симметрия структуры кристаллов - это следствие динамического равновесия многих сил и процессов, в которые включен кристалл. Поэтому внешнее воздействие (электрическое поле и т.д.) может нарушить это равновесие и, следовательно, изменить свойства кристаллов. Это обстоятельство открывает широкие возможности по управлению свойствами кристаллов путем внешнего воздействия.

Следствием закономерности и симметрии структуры кристаллов являются их **однородность, дискретность, симметричность и анизотропность.**

1. *Однородность* кристалла проявляется в существовании так называемого радиуса однородности: как бы в данном кристалле не размещать шар этого радиуса, в нем наряду с любой точкой обязательно содержится

одинаково расположенная точка. Так, в шаре однородности кристалла $NaCl$ содержится два ядра Na , два ядра Cl . Радиус однородности обычно составляет несколько ангстрем, т.е. является величиной порядка постоянной решётки кристалла.

2. *Дискретность*. В то же время кристалл дискретен - любую точку кристалла можно окружить шаром дискретности столь малого радиуса, что внутри него не окажется ни одной точки, ей аналогичной. Для разных точек кристалла радиусы дискретности различны, но все они меньше радиуса однородности.

3. *Симметричностью* называют одинаковость свойств кристалла в разных направлениях в нем.

4. *Анизотропией* называется неодинаковость свойств кристалла в разных направлениях. Анизотропия связана с тем, что в структуре кристалла в разных направлениях различны расстояния и силы связи частиц (но одинаковы в симметричных направлениях).

3.2 Кристаллографическая система координат

Структуру кристалла можно воспроизвести, если переносить на определенное расстояние, именуемое **периодом трансляции**, выбранный элемент (частицу, элементарную ячейку и т.п.). Симметрическое преобразование, с помощью которого выбранный элемент, не поворачиваясь, повторяется в пространстве, называется **трансляцией**. Ячейка, сторонами которой являются элементарные трансляции, называется **элементарной ячейкой**. Принято обозначать длины элементарных трансляций буквами a_1, a_2, a_3 , а углы между ними α, β, γ (см. рис.1 а, б).

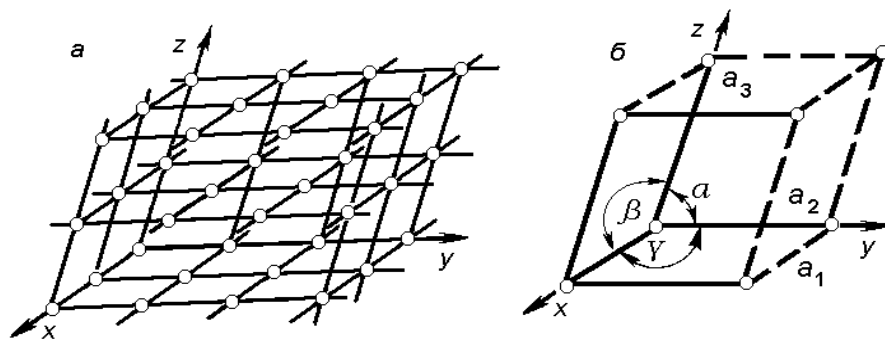


Рис. 1

Для проведения математических операций по описанию структуры элементарной ячейки и кристалла как пространственного образования необходимо ввести систему координат, в которой данный кристалл будет рассматриваться. Это позволит однозначно определять положение любого атома в решетке, устанавливать соотношения, связывающие координаты атомов в элементарной ячейке и т.д. Если за начало координат выбирать какой-либо узел решетки, а оси координат направляем по трем направлениям элементарной трансляции, получим **кристаллографическую систему координат** для данного кристалла. Естественными единицами измерений вдоль соответствующих осей являются длины векторов трансляции. Заметим, что по разным осям координат они могут значительно различаться по величине. На рис.1, б показана кристаллографическая система координат с указанием общепринятых обозначений осей, трансляций и углов между ними.

Таким образом, единственной основой для выбора кристаллографической системы координат кристалла является его пространственная решетка.

3.3 Взаимный векторный базис и обратная решетка

Итак, для выполнения математических операций по описанию структуры кристалла, выполнения численных оценок в кристалле необходимо ввести связанную с ним кристаллографическую систему координат. Однако в ряде практически важных случаев для описания физических явлений кристаллографической системы координат недостаточно и целесообразно ввести другую систему координат. К таким случаям относится, например, изучение переноса электронов в решетке, сопровождающегося многочисленными их столкновениями с решеткой. Процесс столкновения описывается законами сохранения энергии и импульса, но в квантовых системах импульс заменяется на квазиимпульс, который учитывает двойственность природы электрона: он и частица, и волна. Последнее приводит к определению квазиимпульса электрона-волны $p = \hbar k$, где $k = 2\pi/\lambda$. Здесь k – волновой вектор, λ – длина волны, которой описывается состояние данного электрона. Заметим, что размерность волнового вектора – обратная длина. Изменение квазиимпульса при столкновениях необходимо рассматривать в пространстве квазиимпульсов (k_x, k_y, k_z) , т.е. фактически рассматривать столкновения электронов в «обратной» решетке. Но что это такое – обратная решетка и как ее ввести?

Наряду с основным ковариантным базисом (базисом кристаллографической системы координат кристалла) в ряде случаев целесообразно ввести еще один базис, именуемый контравариантным, с базисными векторами $\vec{a}^{(1)}, \vec{a}^{(2)}, \vec{a}^{(3)}$. Его называют **базисом обратной решетки кристалла** и определяют через скалярное произведение с векторами ковариантного базиса

$$\begin{aligned}
\left(\bar{a}_1 \cdot \bar{a}^{(1)}\right) &= 1, \quad \left(\bar{a}_2 \cdot \bar{a}^{(1)}\right) = 0, \quad \left(\bar{a}_3 \cdot \bar{a}^{(1)}\right) = 0, \\
\left(\bar{a}_1 \cdot \bar{a}^{(2)}\right) &= 0, \quad \left(\bar{a}_2 \cdot \bar{a}^{(2)}\right) = 1, \quad \left(\bar{a}_3 \cdot \bar{a}^{(2)}\right) = 0, \\
\left(\bar{a}_1 \cdot \bar{a}^{(3)}\right) &= 0, \quad \left(\bar{a}_2 \cdot \bar{a}^{(3)}\right) = 0, \quad \left(\bar{a}_3 \cdot \bar{a}^{(3)}\right) = 1.
\end{aligned}
\tag{3.1}$$

С использованием символа Кронекера

$$\delta_{\alpha}^{\beta} = \begin{cases} 1 & \alpha = \beta \\ 0 & \alpha \neq \beta \end{cases}$$

эту систему можно переписать так: $\left(\bar{a}_{\alpha} \cdot \bar{a}^{(\beta)}\right) = \delta_{\alpha}^{\beta}$, $\alpha, \beta = 1, 2, 3$. Данная запись показывает, что любой контравариантный базисный вектор (например, $\bar{a}^{(1)}$) перпендикулярен к другим двум ковариантным векторам (\bar{a}_2, \bar{a}_3) и составляет острый угол с одноименным ковариантным базисным вектором ($\bar{a}^{(1)}$). Действительно, если скалярное произведение больше нуля, то угол между векторами меньше прямого.

Так как вектор $\bar{a}^{(1)}$ перпендикулярен векторам \bar{a}_2, \bar{a}_3 , то он параллелен их векторному произведению и, следовательно, его можно определить следующим образом:

$$\bar{a}^{(1)} = K \cdot \left[\bar{a}_2 \times \bar{a}_3 \right].
\tag{3.2}$$

Здесь K – коэффициент пропорциональности, который необходимо определить. Чтобы найти коэффициент пропорциональности, подставим в выражение: $\left(\bar{a}_1 \cdot \bar{a}^{(1)}\right) = 1$ выражение (3.2) для $\bar{a}^{(1)}$ и получим:

$$K \cdot \left[\bar{a}_1 \cdot \left[\bar{a}_2 \times \bar{a}_3 \right] \right] = 1.
\tag{3.3}$$

Заметим, что объем элементарной ячейки в ковариантном базисе равен смешанному произведению базисных векторов: $V = \left[\bar{a}_1 \cdot \left[\bar{a}_2 \times \bar{a}_3 \right] \right] = h \cdot S$, и равен площади основания S на его высоту h . Поэтому из (3.3) следует: $K = 1/V$ и тогда, исходя из выражения (3.2) и аналогичных ему для других векторов обратной решетки, получим:

$$\bar{a}^{(1)} = \left[\bar{a}_2 \times \bar{a}_3 \right] / V, \quad \bar{a}^{(2)} = \left[\bar{a}_3 \times \bar{a}_1 \right] / V, \quad \bar{a}^{(3)} = \left[\bar{a}_1 \times \bar{a}_2 \right] / V. \quad (3.4)$$

Выражения (3.4) показывают, что базисные векторы обратной решетки направлены по нормальям к координатным плоскостям прямой кристаллической решетки, а их длины равны обратным величинам межплоскостных расстояний в прямой решетке h . Действительно, согласно (3.4) имеем

$$a = S/V = S/(Sh) = h^{-1}.$$

Вычислим смешанное произведение базисных векторов обратной решетки: $\left(\bar{a}^{(1)} \cdot \left[\bar{a}^{(2)} \times \bar{a}^{(3)} \right] \right)$, воспользовавшись формулой для вычисления двойного векторного произведения через разность двух скалярных произведений:

$$\left[\bar{A} \times \bar{B} \right] \cdot \bar{C} = \bar{B} \cdot (\bar{A} \cdot \bar{C}) - \bar{C} \cdot (\bar{A} \cdot \bar{B}).$$

Проделав необходимые операции, найдем:

$$\left(\bar{a}^{(1)} \cdot \left[\bar{a}^{(2)} \times \bar{a}^{(3)} \right] \right) = 1/V,$$

т.е. объем элементарной ячейки обратной решетки равен обратной величине объема элементарной ячейки прямой решетки.

Можно показать, что базисные векторы прямой и обратной решеток связаны между собой следующими соотношениями (приводится без вывода):

$$\bar{a}_1 = V \cdot \left[\bar{a}^{(2)} \times \bar{a}^{(3)} \right], \quad \bar{a}_2 = V \cdot \left[\bar{a}^{(3)} \times \bar{a}^{(1)} \right], \quad \bar{a}_3 = V \cdot \left[\bar{a}^{(1)} \times \bar{a}^{(2)} \right]. \quad (3.5)$$

Параллелепипед, построенный на векторах $\bar{a}^{(i)}$, называется кристаллографической элементарной ячейкой обратной решетки. Повторяя ее в пространстве, можно построить обратную решетку кристалла. Имея две тройки базисных векторов, их можно связать между собой. Базисные векторы обратной решетки можно разложить по базису прямой решетки:

$$\begin{cases} \bar{a}^{(1)} = g^{11} \cdot \bar{a}_1 + g^{12} \cdot \bar{a}_2 + g^{13} \cdot \bar{a}_3 \\ \bar{a}^{(2)} = g^{21} \cdot \bar{a}_1 + g^{22} \cdot \bar{a}_2 + g^{23} \cdot \bar{a}_3 \\ \bar{a}^{(3)} = g^{31} \cdot \bar{a}_1 + g^{32} \cdot \bar{a}_2 + g^{33} \cdot \bar{a}_3 \end{cases}$$

или в сокращенном виде:

$$\bar{a}^{(\alpha)} = g^{\alpha\beta} \cdot \bar{a}_\beta \quad . \quad (3.6)$$

Коэффициенты $g^{\alpha\beta}$ называются **контравариантными компонентами** метрического тензора. Чтобы выяснить их смысл, умножим скалярно, например, справа обе части равенства (3.6) на вектор обратной решетки $\bar{a}^{(\gamma)}$:

$$\left(\bar{a}^{(\alpha)} \cdot \bar{a}^{(\gamma)} \right) = g^{\alpha\beta} \cdot \left(\bar{a}_\beta \cdot \bar{a}^{(\gamma)} \right),$$

но по определению $\left(\bar{a}^{(i)} \cdot \bar{a}_j \right) = \delta_{ij}$. Используя это, получим:

$$\left(\bar{a}^{(\alpha)} \cdot \bar{a}^{(\gamma)} \right) = g^{\alpha\gamma} \cdot \delta_{\beta\gamma}$$

и при $\beta = \gamma$ имеем:

$$g^{\alpha\beta} = \left(\bar{a}^{(\alpha)} \cdot \bar{a}^{(\beta)} \right).$$

Таким образом, контравариантные компоненты метрического тензора равны скалярным произведениям соответствующих контравариантных базисных векторов. Так как скалярное произведение нечувствительно к перестановке множителей, то $g^{\alpha\beta} = g^{\beta\alpha}$, что указывает на симметричность тензора $g^{\alpha\beta}$.

Теперь проведем обратное разложение: разложим базисные векторы прямой решетки по базису обратной решетки:

$$\begin{aligned}\bar{a}_1 &= g_{11} \cdot \bar{a}^{(1)} + g_{12} \cdot \bar{a}^{(2)} + g_{13} \cdot \bar{a}^{(3)} \\ \bar{a}_2 &= g_{21} \cdot \bar{a}^{(1)} + g_{22} \cdot \bar{a}^{(2)} + g_{23} \cdot \bar{a}^{(3)} \\ \bar{a}_3 &= g_{31} \cdot \bar{a}^{(1)} + g_{32} \cdot \bar{a}^{(2)} + g_{33} \cdot \bar{a}^{(3)}\end{aligned}$$

В сокращенном виде эти уравнения можно переписать так: $\bar{a}_\alpha = g_{\alpha\beta} \cdot \bar{a}^{(\beta)}$.

Коэффициенты разложения называют **ковариантными компонентами метрического тензора** и могут быть вычислены как скалярные произведения базисных векторов прямой решетки:

$$g_{\alpha\beta} = \bar{a}_\alpha \cdot \bar{a}_\beta \quad (3.7)$$

Наборы чисел $g_{\alpha\beta}$ и $g^{\alpha\beta}$ образуют матрицы, причем они обратны друг другу. Если обозначить $\|g_{\alpha\beta}\| = G$, то $\|g^{\alpha\beta}\| = 1/G$ и тогда $g_{\alpha\beta} \cdot g^{\beta\gamma} = \delta_\alpha^\gamma$.

Из выражений (3.7) следует важный вывод: ковариантные компоненты метрического тензора $g_{\alpha\beta}$ целиком определяются параметрами ячейки (длинами ребер и углами между ними): $a_1, a_2, a_3, \alpha, \beta, \gamma$ (см. рис.1, б):

$$G = \begin{vmatrix} a_1^2 & a_1 \cdot a_2 \cdot \cos \gamma & a_1 \cdot a_3 \cdot \cos \beta \\ a_1 \cdot a_2 \cdot \cos \gamma & a_2^2 & a_2 \cdot a_3 \cdot \cos \alpha \\ a_1 \cdot a_3 \cdot \cos \beta & a_2 \cdot a_3 \cdot \cos \alpha & a_3^2 \end{vmatrix},$$

т.е. если известны компоненты метрического тензора, то можно найти параметры элементарной ячейки в прямой решётке:

$$\begin{aligned}a_1 &= \sqrt{g_{11}}; \quad a_2 = \sqrt{g_{22}}; \quad a_3 = \sqrt{g_{33}}; \\ \alpha &= \arccos\left(\frac{g_{23}}{\sqrt{g_{22} \cdot g_{33}}}\right), \quad \beta = \arccos\left(\frac{g_{13}}{\sqrt{g_{11} \cdot g_{33}}}\right), \quad \gamma = \arccos\left(\frac{g_{12}}{\sqrt{g_{11} \cdot g_{22}}}\right); \\ V &= \sqrt{\det\|G\|}.\end{aligned}$$

Таким образом, если известны компоненты метрического тензора G , то по приведенным выше выражениям можно вычислить все параметры прямой

решетки. Но как определить компоненты $g_{\alpha\beta}$? Их можно найти, если известны контравариантные компоненты метрического тензора $g^{\alpha\beta}$. Значит, задача определения параметров элементарной ячейки прямой решетки кристалла сводится к экспериментальному определению величин $g^{\alpha\beta}$. Как это сделать?

Если исследуется строение какого-либо объекта, то в качестве исследующего инструмента всегда используют такой, геометрические размеры исследовательской части которого меньше характеристических расстояний в объекте: так, исследуя и ремонтируя механизм часов, часовщик использует малогабаритные отвертки, тонкие пинцеты и т.д. Характеристические расстояния в кристалле определяются периодами трансляций и реально они составляют величины от единиц до десятка ангстрем. Отверток и пинцетов таких размеров нет – можно использовать только электромагнитное излучение - именно оно обладает разрешающей способностью, определяемой ее длиной волны. Поэтому чтобы «увидеть» внутреннее строение элементарной ячейки необходимо направить на кристалл не свет (его длина волны составляет тысячи ангстрем), а электромагнитное излучение с длиной волны менее одного ангстрема. Таковым является рентгеновское излучение. Направив поток рентгеновского излучения на исследуемый кристалл и фиксируя отраженное излучение (именно так мы видим окружающий мир – фиксируем отраженный свет), можно видеть, что отраженный рентгеновский поток представляет собой результат дифракции гамма-излучения как от системы параллельных плоскостей. Поскольку отражение квантов рентгеновского излучения от атомов в кристалле происходит в пространстве квазиимпульса, то в отраженном потоке содержится информация о параметрах обратной решетки.

Таким образом, анализируя картину отражения рентгеновского излучения от кристалла, можно вычислить параметры обратной решетки.

Зная их, составляется матрица контравариантных компонент метрического тензора, находится обратная ей матрица, по компонентам которой вычисляются параметры прямой решетки. Описанное выше применение обратной решетки не является единственным – существуют и другие применения.

3.4 Символы узлов, направлений и плоскостей в кристаллах. Индексы Миллера

Предположим, что в кристалле установлена кристаллографическая система координат, начало которой помещено в конкретный узел решетки кристалла. Поскольку нам известны три основные трансляции \bar{a}_1 , \bar{a}_2 , \bar{a}_3 , то положение любого узла в решетке определяется его радиусом - вектором, проведенным из начала координат в рассматриваемый узел:

$$\bar{R} = m \cdot \bar{a}_1 + n \cdot \bar{a}_2 + p \cdot \bar{a}_3,$$

где m , n , p – положительные и отрицательные целые числа. В данном выражении информацию о положении рассматриваемого атома несут числа m , n , p . Поэтому можно характеризовать атом только этими числами. Набор из трех чисел в двойных квадратных скобках $[[m, n, p]]$ называют **символом узла**, а числа m , n , p – **индексами Миллера** узла. Если числа отрицательные, то знак «минус» ставится над соответствующим индексом Миллера, например, $[[\bar{1} \bar{2} \bar{1}]]$.

3.4.1 Символ и индексы Миллера кристаллографического направления

Научившись определять положение точечного объекта в кристалле, перейдем к определению координат линейного объекта – направления. Наша задача заключается в том, чтобы найти удобную математическую форму задания выбранного направления в кристалле. Кристаллографическое направление - это прямая линия, проходящая по крайней мере через два узла решетки. Ввиду бесконечных размеров рассматриваемого кристалла кристаллографические направления, описываемые параллельными прямыми линиями, описывают одно направление. Значит, его можно задать координатами этих двух узлов. Но для упрощения записи один из них принимают за начало системы координат - $[[000]]$ из-за того, что возможен параллельный перенос системы координат. Поэтому кристаллографическое направление полностью определяется лежащим на нем узлом, ближайшим к началу координат. **Символ кристаллографического направления** записывают в одинарных квадратных скобках: $[mnp]$. Числа m , n , p называют **индексами Миллера кристаллографического направления**. Так, кристаллографические оси OX - $[100]$, OY - $[010]$ и OZ - $[001]$.

Совокупность кристаллографических направлений, которые могут быть совмещены операциями точечной симметрии данного кристалла, записывается в угловых скобках - " $\langle mnp \rangle$ " (например, совокупность ребер куба имеет индексы Миллера $\langle 100 \rangle$). Если какое-либо из чисел m , n , p - отрицательное, то знак минус пишут над соответствующим индексом, например, $\langle \bar{1}00 \rangle$. Если индексы Миллера имеют общий множитель, то символ этого кристаллографического направления получают делением исходных индексов на постоянный множитель. Например, символ кристаллографического направления $[20\ 40\ 60]$ отмечает тоже направление, что и символ $[1\ 2\ 3]$, который получен делением индексов Миллера на общий множитель, равный 20.

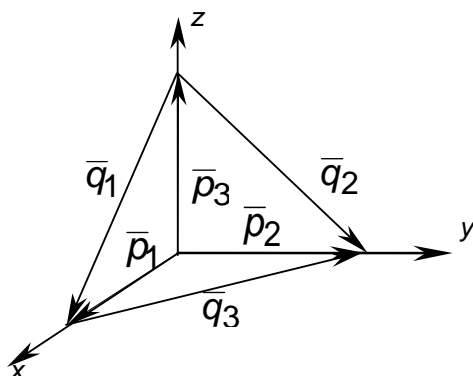
3.4.2. Символ и индексы Миллера кристаллографической плоскости

Предположим, что нам необходимо указать выделенную по каким-то соображениям плоскость в кристалле. Встает вопрос: как ее отличить от других кристаллографических плоскостей? Пусть эта плоскость не проходит через начало координат. Ясно, что положение плоскости однозначно определяется целочисленными отрезками, отсекаемыми ею от кристаллографических осей (см. рис. 2). При этом возможны три случая:

1. плоскость не параллельна ни одной из координатных осей;
2. плоскость параллельна одной из осей, отсекая от других два отрезка;
3. плоскость параллельна двум осям координат.

В принципе, если указывать длины отрезков, отсекаемые плоскостью от координатных осей, то плоскость будет однозначно идентифицирована записью индексов Миллера кристаллографической плоскости, например, в виде (hkl) вполне приемлема. Однако если плоскость параллельна одной или двум координатным осям, то отсекаемые отрезки от этих осей будут бесконечными и, следовательно, предлагаемая запись индексов Миллера такой плоскости будет, например, иметь вид: $(\infty \infty 1)$. При проведении математических вычислений с такими индексами по вычислению параметров кристалла неизбежны бесконечные результаты, а значит и неопределенности.

Значит, вводить индексы Миллера для кристаллографической плоскости, указывая отсекаемые ею от осей координат целочисленные отрезки, нецелесообразно. Будем искать другой способ однозначной идентификации кристаллографической плоскости.



Первый случай. Ясно, что векторы $\bar{\rho}_1 = \rho^1 \cdot \bar{a}_1$; $\bar{\rho}_2 = \rho^2 \cdot \bar{a}_2$; $\bar{\rho}_3 = \rho^3 \cdot \bar{a}_3$ - целочисленны, т.к. расстояния между узлами измеряются в целых величинах, пропорциональных длинам векторов трансляций по осям. Поэтому векторы $\bar{q}_1 = \bar{\rho}_1 - \bar{\rho}_3$, $\bar{q}_2 = \bar{\rho}_2 - \bar{\rho}_3$ и $\bar{q}_3 = \bar{q}_2 - \bar{q}_1$

Рис.2.

также целочисленны и лежат в

рассмат-

риваемой плоскости, а их векторное произведение перпендикулярно плоскости. Два вектора \bar{q}_1 и \bar{q}_2 однозначно определяют положение плоскости, но указывать для идентификации плоскости координаты двух векторов неудобно да и неразумно – это шесть цифр. Попробуем отыскать способ указать её положение более короткой записью. Ввиду произвольного выбора начала кристаллографической системы координат все параллельные плоскости неразличимы и потому положение рассматриваемой плоскости можно охарактеризовать нормалью к ней (рис.2), который определяется следующим образом:

$$\bar{n} = \frac{1}{V} \cdot [\bar{q}_1 \times \bar{q}_2].$$

Здесь для удобства введён нормировочный коэффициент $1/V$, равный объёму элементарной ячейки обратной решетки. Вычислим этот вектор, используя выражения для векторов \bar{q}_1 , \bar{q}_2 и $\bar{\rho}_1$, $\bar{\rho}_2$, $\bar{\rho}_3$:

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \frac{1}{V} \cdot [(\rho_1 - \rho_3) \times (\rho_2 - \rho_3)] = \frac{1}{V} \cdot [\rho^1 \cdot \bar{a}_1 - \rho^3 \cdot \bar{a}_3 \times (\rho^2 \cdot \bar{a}_2 - \rho^3 \cdot \bar{a}_3)] \\ &= \frac{1}{V} \cdot \left(\rho^1 \cdot \rho^2 \cdot [\bar{a}_1 \times \bar{a}_2] + \rho^2 \cdot \rho^3 \cdot [\bar{a}_3 \times \bar{a}_2] + \rho^1 \cdot \rho^3 \cdot [\bar{a}_1 \times \bar{a}_3] - (\rho^3)^2 \cdot [\bar{a}_3 \times \bar{a}_3] \right) = \\ &= \frac{1}{V} \cdot \left(\rho^1 \cdot \rho^2 \cdot [\bar{a}_1 \times \bar{a}_2] + \rho^2 \cdot \rho^3 \cdot [\bar{a}_2 \times \bar{a}_3] + \rho^1 \cdot \rho^3 \cdot [\bar{a}_3 \times \bar{a}_1] \right) \end{aligned}$$

Используя выражения для векторов обратной решетки через векторы прямой решетки, данное выражение можно переписать так:

$$\bar{n} = \rho^1 \cdot \rho^2 \cdot \bar{a}^{(3)} + \rho^2 \cdot \rho^3 \cdot \bar{a}^{(1)} + \rho^1 \cdot \rho^3 \cdot \bar{a}^{(2)}.$$

Обозначив через n_1 , n_2 и n_3 коэффициенты пропорциональности, найдем:

$$\bar{n} = n_1 \cdot \bar{a}^{(1)} + n_2 \cdot \bar{a}^{(2)} + n_3 \cdot \bar{a}^{(3)}.$$

Таким образом, для того, чтобы охарактеризовать положение кристаллографической плоскости, достаточно указать вектор нормали к этой плоскости. Значит, коэффициенты n_1 , n_2 и n_3 можно рассматривать как **индексы Миллера кристаллографической плоскости** и, следовательно, **символ кристаллографической плоскости** можно записать в виде: $(n_1 \ n_2 \ n_3)$.

Второй случай. Пусть рассматриваемая плоскость параллельна оси X . Это означает, что у плоскости имеется всего два отрезка: $\bar{p}_2 = p^2 \cdot \bar{a}_2$ и $\bar{p}_3 = p^3 \cdot \bar{a}_3$, а сама плоскость параллельна векторам \bar{a}_1 и $\bar{q}_2 = \bar{p}_2 - \bar{p}_3$. Нормаль к ней есть вектор:

$$\bar{n} = \frac{1}{V} \cdot \left[\bar{p}_1 \times \bar{q}_2 \right],$$

откуда находим:

$$\bar{n} = p^3 \cdot \bar{a}^2 + p^2 \cdot \bar{a}^3 \quad \text{или} \quad \bar{n} = n_\alpha \cdot \bar{a}^\alpha,$$

где $n_1 = 0$, $n_2 = p^3$, $n_3 = p^2$ - индексы Миллера кристаллографической плоскости, проходящей через одну координатную ось.

Третий случай. По условию задачи плоскость параллельна осям X и Y и отсекает от оси Z отрезок. Она параллельна векторам \bar{a}_1 и \bar{a}_2 , потому

$$\bar{n} = \frac{1}{V} \cdot \left[\bar{a}_1 \times \bar{a}_2 \right] \equiv \bar{a}^{(3)}.$$

Следовательно, в выражении $\bar{n} = n_\alpha \cdot \bar{a}^{(\alpha)}$ имеем: $n_1 = 0$, $n_2 = 0$, $n_3 = 1$ - это индексы Миллера плоскости, проходящей через две координатные оси.

Таким образом, координаты вектора нормали к кристаллографической плоскости однозначно указывают положение выбранной плоскости и потому

могут рассматриваться как ее индексы Миллера в прямой решётке. Они записываются так же, как и индексы направления, но в круглых скобках: $(n_1 \ n_2 \ n_3)$. Однако не следует забывать, что индексы Миллера кристаллографической плоскости относятся к вектору в обратной решетке и что они обратно пропорциональны длинам отрезков, отсекаемых плоскостью от координатных осей в прямой решетке. Для первого случая

$$n_1 : n_2 : n_3 = p_2 p_3 : p_1 p_3 : p_1 p_2 = \frac{1}{p_1} : \frac{1}{p_2} : \frac{1}{p_3}.$$

Для второго случая: $n_2 : n_3 = p^3 : p^2 = \frac{1}{p^2} : \frac{1}{p^3}$. Умножая все три координаты

на выбранное число, их можно всегда сделать целочисленными. Координатные плоскости прямой решетки характеризуются следующими индексами Миллера: (001) - YOZ; (100) - XOZ, (010) - XOY.

Таким образом, введение обратной решетки упрощает запись координат кристаллографической плоскости, исключив возможные бесконечные значения индексов по отдельным осям, с которыми данная плоскость не пересекается, а также уменьшив число задаваемых цифр до трех. Поэтому использование представления об обратной решетке позволяет всегда получать конечные значения индексов Миллера и тем самым исключить возможные неопределенности при математической обработке параметров плоскости.

3.5. ТЕОРИЯ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

3.5.1. Элементы точечной симметрии кристаллов

Окружающий нас мир в своем устройстве подчинен многим законам, в частности, подавляющее большинство объектов материального мира имеют геометрически правильную форму. Говорят, что они имеют «симметричный

вид». Как правило, симметричный вид материального объекта свидетельствует о его сложном внутреннем строении, длительной эволюции. Установлено, что все симметричные фигуры материального мира могут быть сведены к комбинациям конечного числа простых геометрических фигур: сферы, куба, пирамиды и т.д. Для описания же симметрии этого набора геометрических фигур требуется конечное число элементов симметрии. Под элементами симметрии геометрической фигуры понимаются такие элементарные действия над ней, в результате выполнения которых фигура совмещается сама с собой.

Геометрической симметрией кристаллографического пространства называется свойство пространства совмещаться с самим собой путем симметрических преобразований, к которым относятся: отражения, вращения, переносы. Симметрические преобразования делятся на *конечные* (или *точечные*), при которых хотя бы одна точка пространства остается неподвижной, и *бесконечные*. Первые соответствуют преобразованиям симметрии элементарных ячеек кристаллов, а вторые - симметрии пространственных структур.

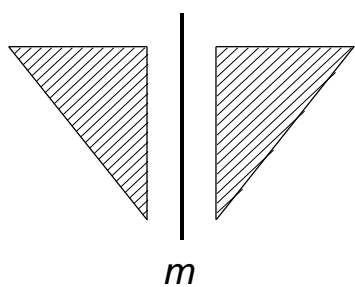


Рис. 3

Важным свойством всех симметрических преобразований является следующее: при всех преобразованиях симметрии расстояния между точками фигуры не изменяются, т.е. не происходит растяжения, изгиба, кручения кристалла. Рассмотрим точечные преобразования симметрии.

Плоскость симметрии (её наличие в фигуре обозначают символом «*m*») – это плоскость, которая делит фигуру на две зеркально равные части (рис. 3). Плоскость симметрии можно представлять себе как зеркало внутри фигуры: все, что находится перед зеркалом, отразившись в нем, точно совмещается с той частью фигуры, которая

находится за зеркалом. Примером плоскости симметрии является плоскость, делящая яблоко по его сердцевине на две равные части, а также вертикальная плоскость, проходящая вертикально по середине через человека. Если нормаль к плоскости направлена по оси X (рис. 4), то эту плоскость обозначают m_x , если по оси Y , то m_y и т.д. На рисунках, отображающих элементы симметрии фигуры, плоскость симметрии рисуют толстой линией.

Центром симметрии (его обозначают латинской буквой « I » и иногда называют центром инверсии) называется особая точка внутри фигуры,

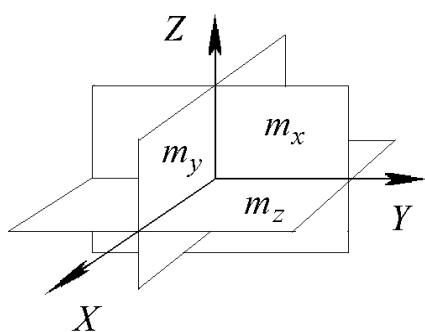


Рис. 4

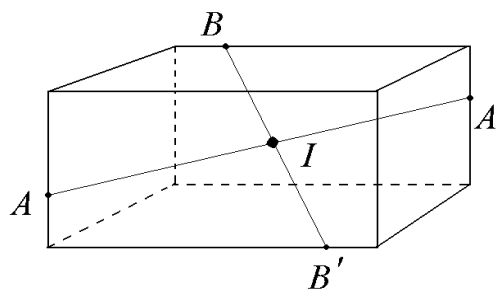


Рис. 5

характеризующаяся тем, что любая проведенная через нее прямая встречает одинаковые (говорят, «гомологичные») точки по обе стороны от нее и на равных расстояниях (рис. 4): $A - A'$, $B - B'$ (см. рис. 5). Действие симметрии центра инверсии - это отражение в точке, в которой он находится. Обычно это геометрический центр фигуры.

Ось симметрии n -ого порядка (её наличие в фигуре обозначают символом « n ») – это прямая линия, при повороте вокруг которой на некоторый угол фигура совмещается сама с собой. Наименьший угол поворота равен: $\alpha = 2\pi/n$. Всего поворотов у оси n - штук: $\alpha, 2\alpha, 3\alpha, \dots, n\alpha$. Примером оси четвертого порядка является ось, проходящая через две противоположные грани куба.

На рис. 6 в качестве примера наличия у фигуры оси симметрии показан правильный четырехугольник, обладающий осью симметрии четвертого порядка, проходящей через центр фигуры перпендикулярно плоскости рисунка. На рисунках ось симметрии изображают в виде тонкой сплошной или пунктирной прямой, положение которой соответствует положению оси симметрии в рассматриваемой фигуре. На концах этой прямой помещают зачерненный многоугольник с числом углов, равным порядку оси симметрии. Так, на концах оси симметрии третьего порядка рисуют треугольник, оси шестого порядка - шестиугольник и т.д. В элементах симметрии кристаллов порядок оси симметрии n не может быть равным пяти и быть больше шести. Порядок осей симметрии идеальных кристаллов может быть равен только 1, 2, 3, 4, 6. Это можно доказать двумя способами.

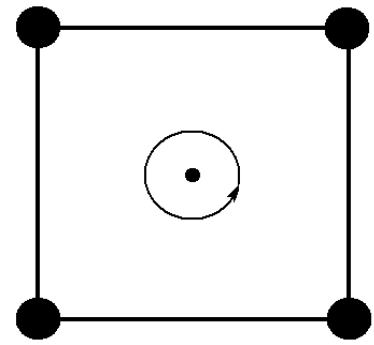


Рис. 6

Логическое доказательство. Доказательством этого утверждения является следующее обстоятельство: фигура (в нашем случае элементарная ячейка кристалла) должна быть такой симметрии, чтобы, укладывая ей подобные рядом для получения кристалла, можно было бы плотно заполнить всю плоскость. Если это удастся, то элементарные ячейки такой симметрии будут плотно прилегать друг к другу, образуя механически прочный кристалл. Для этой цели можно применить следующие плоские фигуры: любой многоугольник неправильной формы (имеет ось симметрии порядка $n = 1$), прямоугольный четырехугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 2$), равносторонний треугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 3$), квадрат (имеет ось симметрии порядка $n = 4$) и шестиугольник (имеет ось симметрии порядка $n = 6$). Примером последней ситуации является пчелиный улей, составленный из шестиугольных сот. Но невозможно провести плотную

упаковку плоскости пятиугольниками, семиугольниками, восьмиугольниками и т.д. – между отдельными фигурами обязательно будут пустоты. Это легко проверить, вырезая пятиугольники и складывая их на плоскости до плотного её заполнения. Отсутствие плотной упаковки между элементарными ячейками кристалла приведет к тому, что ячейки будут слабо связаны друг с другом. Любое внешнее воздействие разрушит такой кристалл до элементарных ячеек.

Геометрическое доказательство. Покажем, что в идеальных кристаллах порядок оси симметрии n может принимать значения только 1, 2, 3, 4, 6.

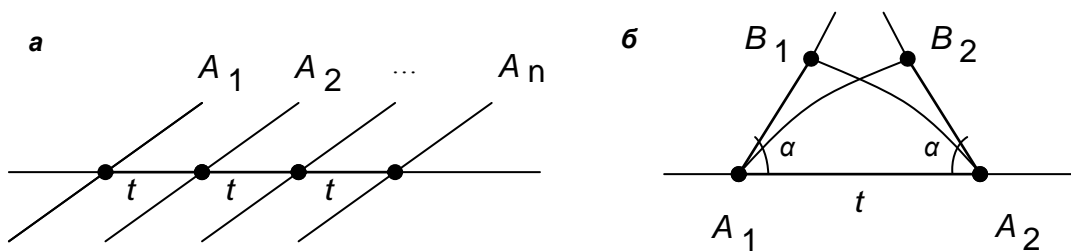


Рис.7

Пусть имеется плоская симметричная фигура, составленная из объектов A_i , каждая из которых имеет ось симметрии n -того порядка. Это аналог кристалла, составленного из элементарных ячеек. Рассмотрим в этой фигуре ряд объектов A_1, A_2, \dots, A_m , (см. рис.7, а). Здесь t - период трансляции ряда. Важно помнить, что вверху и внизу от выбранной цепи объектов находятся точно такие же цепочки объектов. Выберем два соседних объекта A_1, A_2 и произведем поворот всей цепочки на угол α сначала вокруг A_1 , а затем вокруг A_2 . После поворота объект A_2 переходит в положение B_1 , объект A_1 - в B_2 . Цепочка не изменится, если длина отрезка B_1B_2 удовлетворяет требованию: $B_1B_2 = Nt$, где N - целое число. Это условие означает, что после поворота цепочка будет иметь период трансляции, кратный исходному –

только в этом случае объекты A_1, A_2, \dots, A_m совпадут с объектами из другого ряда (верхнего или нижнего). Из рассмотрения треугольников рис. 7, б следует:

$$B_1B_2 = A_1A_2 - 2\Delta = t - 2t \cdot \cos \alpha = Nt \quad \text{или} \quad 1 - 2\cos \alpha = N.$$

Простые преобразования дают: $\cos \alpha = \frac{1-n}{2}$. При этом $|\cos \alpha| \leq 1$.

Изменяя N , определим значения угла α , отвечающие условию существования оси симметрии n -того порядка (Таблица 1).

Таблица 1. *Определение порядка оси симметрии*

N	-1	0	1	2	3
$\cos \alpha$	1	1/2	0	-1/2	-1
α	0	60°	90°	120°	180°
n	1	6	4	3	2

Таким образом, диапазон возможных значений n действительно ограничен указанным набором чисел.

При рассмотрении действия плоскости симметрии и оси симметрии второго порядка можно заметить большое сходство в их действии, если ось симметрии лежит в плоскости симметрии. Однако, в действительности их действия различны. Наиболее отчетливо различие в их действии можно видеть, если рассмотреть преобразование сложного объекта обоими элементами симметрии, например, двухцветного объекта плоскостью симметрии m и лежащей в геометрической плоскости Q осью симметрии с $n = 2$ (рис.8).

Инверсионной осью симметрии n - того порядка (обозначают как ось симметрии с чертой сверху, которая указывает на наличие центра симметрии - \bar{n}) называется ось симметрии n - того порядка с расположенным на ней

центром инверсии. Являясь комбинацией двух элементов симметрии, для осей симметрии третьего, четвертого и шестого порядков инверсионная ось дает преобразования, которые невозможно получить другими элементами симметрии или их сочетаниями. По этой причине инверсионная ось выделена в отдельный элемент симметрии.

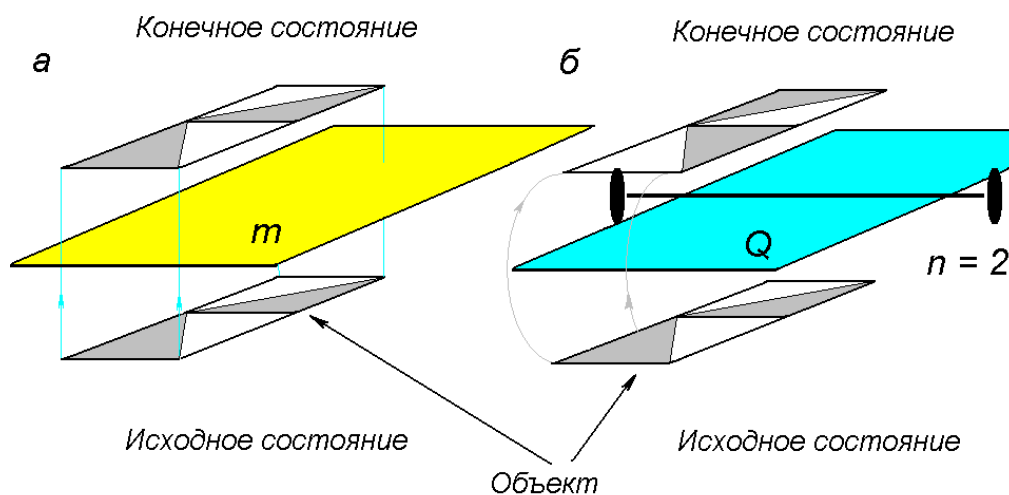


Рис.8

Элемент симметрии может породить несколько операций симметрии: ось симметрии третьего порядка - повороты на углы 120° , 240° и 360° ; ось 6 - на 60° , 120° , 180° , 240° , 360° . Таким образом, ось 6 порождает оси порядка 3 (углы поворота 120° , 240° и 360°) и 2 (углы поворота 180° и 360°). Образование новых элементов симметрии особенно важно при сочетании нескольких элементов.

3.5.2. Свойства элементов точечной симметрии

Перечислим основные свойства элементов точечной симметрии, которые определяют появление дополнительных элементов симметрии при наличии нескольких порождающих элементов.

1. Линия пересечения двух плоскостей симметрии является осью симметрии с углом поворота α в два раза большим, чем угол между плоскостями. Доказательство этого свойства сводится к геометрическому построению двух пересекающихся плоскостей и рассмотрению преобразования ими объекта.

2. Точка пересечения оси симметрии четного (второго) порядка с перпендикулярной к ней плоскостью симметрии есть центр симметрии (это сочетание элементов обозначают как n/m , а в рассматриваемом случае $2/m$).

3. Если вдоль оси симметрии n -того порядка проходит плоскость симметрии, то таких плоскостей в фигуре имеется n - штук (это сочетание элементов обозначают как nm).

4. Равнодействующая двух пересекающихся осей симметрии является третья ось, проходящая точку их пересечения и обязательно перпендикулярно им.

5. Если перпендикулярно к оси симметрии n -того порядка проходит ось симметрии второго порядка, то имеется n осей второго порядка, перпендикулярных оси n -того порядка.

Следует отметить, что приведённые выше свойства остаются справедливыми при замене в них местами причин и следствий. Так, второе свойство можно прочесть следующим образом: наличие на оси симметрии второго порядка центра инверсии означает, что в этом наборе элементов симметрии должна быть также плоскость симметрии, проходящая через центр и перпендикулярная оси симметрии. Другой вариант второго свойства: если на плоскости симметрии имеется центр инверсии, то в этом наборе элементов симметрии должна также быть ось симметрии второго порядка,

проходящая через центр симметрии перпендикулярно плоскости симметрии. Аналогичным образом можно поступать и с другими четырьмя свойствами.

3.5.3. Матричное представление элементов симметрии

В данном параграфе показан способ математического описания действия элементов точечной симметрии.

При симметричных преобразованиях объекта имеется две основные возможности математического описания совершённого действия: либо перевести объект в новое положение в исходной системе координат (т.е. при неподвижном наблюдателе объекта), либо оставить объект неподвижным, а переместить наблюдателя этой фигуры, т.е. фактически переместить систему координат. При первом подходе требуется записать математические выражения, описывающие перемещение каждой точки объекта в новое положение. В этом случае требуется также знание координат каждой точки объекта, траектории их перемещения, что громоздко и требует больших затрат сил. Поэтому второй путь оказывается предпочтительнее, т.к. он технически проще и к тому же позволяет воспользоваться имеющимися методами аналитической геометрии. В этом случае точку, остающуюся неподвижной, выбирают за начало координат ортогональной системы $X_1 X_2 X_3$. Тогда действие любой операции точечной симметрии будет представлять собой перевод осей координат $X_1 X_2 X_3$ в новые ортогональные положения $X_1' X_2' X_3'$. Углы между новыми $(X_1' X_2' X_3')$ и старыми $(X_1 X_2 X_3)$ осями определяются таблицей направляющих косинусов, она представляет собой матрицу преобразования координат (см. Таблицу 2 в тексте). Любая ось в

новой системе координат X_i' может быть выражена через исходные координатные оси следующим образом:

$$X_i' = C_{i'1} X_1 + C_{i'2} X_2 + C_{i'3} X_3 . \quad (3.8)$$

Первый индекс в символе $C_{i'j}$ ($i', j=1, 2, 3$) относится к новым осям, а второй к старым. Для того чтобы показать, что коэффициенты разложения по (3.8) $C_{i'j}$ являются косинусами углов между новыми и старыми координатными осями, заменим в выражении (3.8) оси координат ортами по соответствующим осям и умножим полученное выражение скалярно на орт старой системы, например, по оси X_3 - \bar{e}_3 и рассмотрим справа налево полученный результат.

Таблица 2. Связь между системами координат

	X_1	X_2	X_3
X_1'	$C_{1'1}$	$C_{1'2}$	$C_{1'3}$
X_2'	$C_{2'1}$	$C_{2'2}$	$C_{2'3}$
X_3'	$C_{3'1}$	$C_{3'2}$	$C_{3'3}$

$$\left(\bar{e}_i' \cdot \bar{e}_3\right) = C_{i'1} \left(\bar{e}_1 \cdot \bar{e}_3\right) + C_{i'2} \left(\bar{e}_2 \cdot \bar{e}_3\right) + C_{i'3} \left(\bar{e}_3 \cdot \bar{e}_3\right) . \quad (3.9)$$

Скалярное произведение орта \bar{e}_3 на самого себя даст единицу, т.к. модуль орта равен единице и косинус угла равен единице. Далее, скалярное произведение орта \bar{e}_3 на орт \bar{e}_2 дает ноль, т.к. орты перпендикулярны друг другу, а косинус прямого угла равен нулю. По этой же причине будет равно нулю и первое слагаемое правой части выражения (3.9). Поэтому будем иметь

$$\left(\bar{e}_i' \cdot \bar{e}_3\right) = \left|\bar{e}_i'\right| \cdot \left|\bar{e}_3\right| \cdot \cos\left(\bar{e}_i', \bar{e}_3\right) = 1 \cdot 1 \cdot \cos\left(\bar{e}_i', \bar{e}_3\right) = C_{i'3} . \quad (3.10)$$

Так, $C_{2'3}$ - это косинус угла между осями X_2' и X_3 . Угол поворота считается положительным, если при наблюдении из положительного конца оси в направлении к началу координат поворот от старой оси к новой происходит против часовой стрелки. Матрица преобразования системы координат будет:

$$\|C_{ij}\| = \begin{pmatrix} C_{11}' & C_{12}' & C_{13}' \\ C_{21}' & C_{22}' & C_{23}' \\ C_{31}' & C_{32}' & C_{33}' \end{pmatrix}.$$

Проверить правильность ее составления можно, вычислив определитель - он должен быть равен ± 1 . Для преобразований первого рода (это повороты вокруг осей симметрии любого порядка, когда правая система координат остается правой, а левая - левой), определитель матрицы преобразования равен «+1», а для преобразования второго рода (отражения в плоскости, в центре инверсии и инверсионные повороты) - «-1».

Обратное преобразование – переход от новой системы координат ($X_1' X_2' X_3'$) к старой ($X_1 X_2 X_3$)

$$\bar{e}_k = C_{i'k} \cdot \bar{e}_i'$$

характеризуется матрицей, которая является обратной к матрице косинусов и транспонирована по отношению к ней:

$$C_{i'k} C_{kj}' = \delta_{ij}'.$$

Такие матрицы называют **ортогональными**. Квадрат их определителя равен

$$\Delta = \det\|C_{i'k}\| = \pm 1.$$

Результат последовательного произведения двух ортогональных преобразований: $\bar{e}_j \rightarrow \bar{e}_j' \rightarrow \bar{e}_j''$, можно записать в виде: $\bar{e}_j'' = C_{i''k} \bar{e}_k$, причем матрица $C_{i''k}$ выражается через матрицы первого $C_{j'k}$ и второго преобразования $C_{i''j'}$ следующим образом:

$$C_{i'k}'' = C_{i'j}' C_{j'k},$$

т.е. матрица, соответствующая преобразованию, проводимому раньше, ставится справа. Здесь следует подчеркнуть, что матрицы обеих преобразований составляются из одной исходной системы координат, которую принято брать правой. Некоммутативность матричного преобразования отражает некоммутативность ортогональных преобразований.

3.6. Стереографическая проекция кристаллов

Предположим, что необходимо точно передать форму сложной симметричной геометрической фигуры. Рисовать её на бумаге не всегда технически возможно. Чтобы точно передать симметрию геометрического многогранника, необходим свой набор символов, свой язык (для записи на бумаге текстового сообщения изобретен алфавит и правила пользования им, для записи музыкального произведения изобретён свой язык - ноты и нотная грамота и т.д.). Отдельные элементы описания симметрии фигур («ноты» – плоскости симметрии, оси симметрии, центр инверсии уже введены в рассмотрение.

Осталось с их помощью установить правила отображения симметрии геометрической фигуры. Их устанавливает стереографическая проекция фигуры.

Стереографическая проекция применяется для изображения элементов симметрии геометрических фигур, в частности, симметрии кристаллов. Ее строят следующим

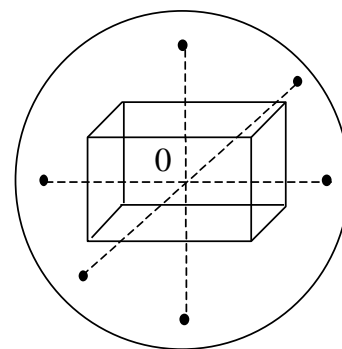


Рис. 9

образом. Первый шаг на пути формализации состоит в переходе от сложной объемной фигуры к сферической фигуре, несущей информацию о симметричных свойствах фигуры. Для этого рассматриваемый многогранник мысленно помещается

в центр прозрачной сферы - *сферы проекций* - такого радиуса, чтобы в неё поместилась вся фигура (см. рис. 9). Геометрические центры их также совмещают. Затем имеющиеся у многогранника элементы симметрии продолжают до их пересечения со сферой проекций. Получающиеся при этом точки и линии пересечения со сферой проекций называют *полюсными точками, полюсными линиями*. В итоге весь набор элементов симметрии многогранника оказывается скопирован на сферу. Но рисовать систему полюсных точек и набора линий, расположенных на сфере, почти также ненаглядно, как и рисовать самую фигуру – человеческое воображение плохо работает с пространственными фигурами, но значительно лучше с нарисованными на плоскости изображениями и фигурами. Для дальнейшего упрощения полученной информации о симметрии фигуре пространственное представление преобразуют в плоскостное: систему полюсных точек со сферы переносят на *плоскость проекций* - плоскость Q на рис.10. Наиболее удобное положение этой плоскости - экваториальное. Перенос полюсных точек на плоскость проекций проводят следующим образом. Если необходимо получить стереографическую проекцию линии AO , соединяют полюсную точку A с южным полюсом сферы проекций. Точка пересечения линии AS с экваториальной плоскостью Q – точка a и есть стереографическая проекция направления AO . Наклонные оси симметрии, расположенные в верхней части сферы, проецируются внутри круга проекций - след от пересечения сферы проекций и плоскости проекций. Вертикальная линия в стереографической проекции выглядит как точка в центре круга, а горизонтальная - как две точки на окружности экватора. Окружность,

полученная на сфере проекций, на стереографической проекции выглядит как окружность, эллипсоид или прямая линия в зависимости от её положения в пространстве: параллельна плоскости проекций, находится ли под острым углом или перпендикулярно к плоскости Q , соответственно.

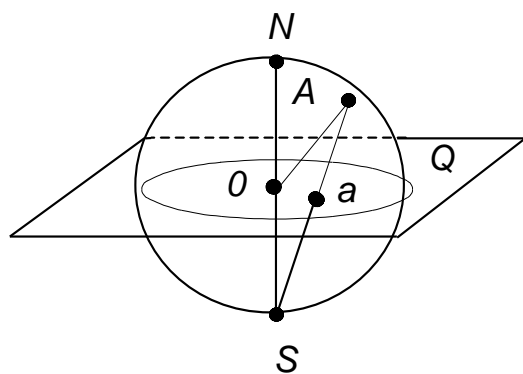


Рис.10

На стереографической проекции полюсные точки от оси симметрии рисуют в виде тонкой линии, на концах которой находится зачерненный многогранник с числом углов, равным порядку оси симметрии. Так, ось симметрии второго порядка изображают в виде зерна (чечевицы), ось симметрии третьего

порядка - в виде треугольника, а ось симметрии четвертого порядка - четырехугольника. На плоскости проекций плоскость симметрии изображается в виде жирной прямой линии (если плоскость перпендикулярна плоскости проекций) или в виде окружности, эллипса, если угол между ней и плоскостью проекций меньше 90° .

На стереографической проекции не искажаются угловые соотношения. По этой причине при построении стереографической проекции форма геометрической фигуры передается точно и полностью. В Таблице 1 ПРИЛОЖЕНИЯ показаны правила выбора кристаллографической системы координат в кристаллах различной симметрии, а в Таблице 2 - стереографические проекции кристаллов всех точечных групп симметрии.

3.7. Кристаллографические категории, системы, сингонии

В зависимости от наличия элементов симметрии и их сочетания в элементарной ячейке все кристаллы разделяются на категории, системы и сингонии. Прежде, чем перейти к этим понятиям, введем определение особенного направления в кристалле. **Особенное направление** в кристалле – это кристаллографическое направление, выделенное осью симметрии или плоскостью симметрии и которое не может быть совмещено с другим выделенным направлением никакими элементами симметрии этого кристалла. Типичным примером особенного направления в геометрической фигуре служит ось симметрии с $n = 4$ в четырехгранной пирамиде. В кубе особенных направлений нет. В низкосимметричных кристаллах особенных направлений может быть два и более. Повторяющиеся в кристалле направления, совмещаемые между собой элементами симметрии ячейки, называются **симметрически эквивалентными**.

В зависимости от числа особенных направлений и от имеющихся осей симметрии кристаллы разделяются на три категории:

- **высшая категория** - особенных направлений нет, есть несколько осей симметрии порядка выше 2, но нет осей симметрии шестого порядка (характерная фигура для этой категории - куб);

- **средняя категория** характеризуется наличием одного особенного направления, совпадающего с единственной осью симметрии порядка 3, 4, 6 (характерная фигура этой категории - пирамида);

- **низшая категория** - кристалл имеет несколько особенных направлений, есть оси симметрии порядка 2 и плоскости симметрии, осей симметрии порядка 3, 4, 6 нет (характерная фигура этой категории - прямоугольный четырехугольник, например, кирпич).

К высшей категории относятся кристаллы с высокой симметрией. Из физических соображений ясно, что свойства кристаллов в симметрически эквивалентных направлениях должны быть одинаковы. Поэтому в кристаллах

высшей категории анизотропия физических свойств выражена слабо, а свойства, описываемые тензором второго ранга (электропроводность, теплопроводность и т.д.), в этих кристаллах оказываются изотропными, т.е. не зависят от направления воздействия и направления регистрации этого свойства.

К средней категории относятся кристаллы, у которых имеется одно особенное направление. В этих кристаллах анизотропия физических свойств имеет место и достаточно ярко выражена: физические свойства, измеренные вдоль главной оси симметрии, численно отличаются от свойств, измеренных в перпендикулярной к ней плоскости.

К низшей категории относятся кристаллы с наименьшим числом элементов точечной симметрии. Поэтому анизотропия физических свойств в них максимальна.

С другой стороны, три категории разделяют на семь кристаллографических **систем**. Критерием деления кристаллов по системам является сочетание в кристаллах данной системы осей симметрии определенного порядка и наличие характерной симметрии.

Низшая категория делится на три системы:

- *триклинная* (три клина система не имеет ни осей, ни плоскостей симметрии. Она может иметь только ось симметрии первого порядка и центр инверсии);
- *моноклинная* (один угол) система имеет лишь одну ось симметрии второго порядка или одну плоскость симметрии, или то и другое одновременно;
- *ромбическая* система имеет более одной оси симметрии второго порядка и более одной плоскости симметрии.

Средняя категория подразделяется также на следующие три кристаллографические системы:

- *тригональная* система имеет одну ось симметрии 3 или $\bar{3}$;
- *тетрагональная* - имеет оси 4 или $\bar{4}$;
- *гексагональная* - имеет оси 6 или $\bar{6}$.

Высшая категория состоит из единственной системы:

- *кубическая*, характеризуемая наличием четырех осей симметрии третьего порядка ($n = 3$).

Для решения кристаллофизических задач вместо разделения кристаллов на системы проводят разделение кристаллов на шесть **сингоний**. Разделение на сингонии производится по выбору начальной установки кристаллографической системы координат. Оси координат кристаллографической системы координат договорились всегда ориентировать по осям симметрии элементарной ячейки кристалла или по нормальям к ее плоскостям симметрии. Понятие сингонии совпадает с понятием системы кроме тригональной и гексагональной систем, поскольку в этих системах есть угол поворота в 120° .

К высшей категории относится одна сингония - *кубическая*, симметрии которой соответствует декартова система координат с $|\bar{a}_1| = |\bar{a}_2| = |\bar{a}_3|$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$. Оси координат направляют по осям 4, $\bar{4}$ или осям порядка 2. Кроме того, у кристаллов кубической сингонии обязательно имеется четыре оси третьего порядка, направленные по пространственным диагоналям куба. Понятия кубической сингонии и кубической системы совпадают.

К средней категории относятся две сингонии:

- *тетрагональная* (главная ось порядка 4 или $\bar{4}$);
- *гексагональная* (главная ось порядка 6 или $\bar{6}$, 3 или $\bar{3}$).

В этих сингониях главная ось всегда совмещается с осью Z , а оси X и Y перпендикулярны к главной оси. Здесь же $|\bar{a}_1| = |\bar{a}_2| \neq |\bar{a}_3|$. Для тетрагональных кристаллов понятия системы и сингонии совпадают, а для гексагональных -

нет. Причина этого заключается в том, что ось шестого порядка содержит углы поворота оси симметрии третьего порядка, равные 120° , 240° , 360° . Следовательно, только в этих двух системах две оси координат (оси X и AO), будучи перпендикулярны третьей оси, расположены под углом 120° относительно друг друга. Поэтому гексагональная система и тригональная система фактически могут быть объединены общим правилом выбора кристаллографической системы координат. По этой причине гексагональная система включает в себя тригональную, образуя гексагональную сингонию.

Для низшей категории понятия сингоний и систем совпадают и потому здесь три сингонии: *триклинная, моноклинная, ромбическая*. В этих сингониях расположение осей кристаллографической системы координат определяется элементами точечной симметрии (см. Таблицу 1 ПРИЛОЖЕНИЯ).

3.8. Точечные группы симметрии кристаллов.

Символики точечных групп

Множество операций симметрии идеального кристаллического многогранника, в результате действия которых этот многогранник совмещается сам с собой, образуют точечную группу симметрии кристалла. Число различных операций точечной симметрии, входящих в группу, называется **порядком группы**.

Точечные группы симметрии кристаллов - одна из возможных реализаций математических групп. В математике группой называют множество G элементов a, b, c, \dots , удовлетворяющих следующим критериям:

1. для всех элементов группы a и b существует также элемент группы c

$$c = a \times b, \quad d = b \times a;$$

2. для всех элементов группы действует закон ассоциативности:

$$a \times (b \times c) = (a \times b) \times c;$$

3. в группе есть единичный элемент (обозначают как 1):

$$1 \times a = a \times 1 = a;$$

4. для любого элемента a группы существует обратный элемент a^{-1} , так что их последовательное применение дает единичный элемент:

$$a \times a^{-1} = a^{-1} \times a = 1 .$$

Рассмотрим свойства таких групп применительно к элементам симметрии кристаллов.

1. Многократное применение любого элемента симметрии кристалла в конце концов приводит его в исходное положение, т.е. в точечной группе единичный элемент связан с элементами симметрии, входящими в группу: $I^2=1, m^2=1, 2^2=1, 3^3=1, 4^4=1, 6^6=1$.

2. Если есть какое-либо преобразование симметрии, то в группе имеется операция, обратная к данному преобразованию, т.е. возвращающая многогранник назад. Эта операция обозначается как A^{-1} и имеет следующее свойство:

$AA^{-1}=1$. Заметим, что операции $1, m, 2$ обратны сами себе.

3. Единичным элементом симметрии является ось симметрии порядка $n = 1$.

Теперь, зная свойства элементов точечных групп, совсем не обязательно для характеристики этих групп перечислять все элементы групп - можно ограничиться перечислением только порождающих элементов (**генераторов группы**) и тем самым охарактеризовать всю группу.

Чтобы различать разные точечные группы между собой необходимо им дать «имена», называемые **символами** точечных групп. На настоящее время существует несколько способов составления символа точечной группы симметрии кристалла:

1. международная символика;
2. символика Бравэ ;

3. символика Шенфлиса;
4. символика Шубникова.

В международной символике класса симметрии пишутся только порождающие элементы симметрии - плоскости или оси; зная свойства элементов, можно восстановить всю группу. Определено, что символ имеет не более трех позиций, но иногда может содержать одну или две позиции. Наличие в группе центра инверсии отдельным символом не указывается - он «прячется» в инверсионные оси симметрии или в точки пересечения оси симметрии второго порядка и плоскости симметрии. Определяющее значение имеет порядок записи элементов симметрии в символе: смысл цифры или буквы зависит от позиции в символе. В приведенной выше таблице дан порядок составления международного символа. Рассмотрим правила составления международного символа для кристаллов различных категорий, сингоний в порядке их следования в приводимой ниже Таблице 3.

Кристаллы низшей категории. В символах классов триклинной системы присутствует один знак: 1 или $\bar{1}$. Аналогично с моноклинной сингонией: в них может быть только ось симметрии второго порядка, или плоскость симметрии или то и другое одновременно. Поэтому символ точных групп этой сингонии состоит из одной позиции: буквы или (и) цифры: m , 2, $2/m$. В кристаллах ромбической сингонии, по правилу ее составления, возможно несколько осей симметрии второго порядка несколько плоскостей симметрии или их комбинация. Поэтому международный символ точечных групп симметрии, относящихся к кристаллам ромбической сингонии, имеет заполненные три позиции: 222 , mmm , $mm2$. Здесь первая позиция указывает на наличие элемента симметрии, направленного по оси X_1 , вторая позиция - по оси X_2 и третья - по оси X_3 . Например, символ 222 говорит о том, что по все трем осям направлены оси симметрии второго порядка.

Кристаллы средней категории. В символах классов средней категории на первом месте стоит главная ось симметрии (3, 4, 6), направленная вдоль оси Z . На втором месте стоят координатные элементы симметрии в плоскости XOY , а на третьем - диагональные элементы симметрии в плоскости XOY . Например, символ $4mm$ означает: имеется ось с $n=4$, которая направлена по оси Z . Через ось Z и по осям X и Y проходят две плоскости симметрии (второй символ) и две плоскости симметрии по диагоналям между X и Y (третий символ).

Таблица 3. Порядок позиций в международном символе точечной группы

Сингонии	Позиция в символе		
	1	2	3
Триклинная	Один символ, соответствующий любому направлению в кристалле	Позиция пустая	Позиция пустая
Моноклинная	Ось 2 или нормаль к m вдоль оси Y или оси Z	Позиция пустая	Позиция пустая
Ромбическая	Ось 2 или нормаль к m вдоль оси X или оси Y или оси Z		
Тетрагональная Гексагональная	Главная ось Симметрии (всегда по оси Z)	Ось 2 или нормаль к m вдоль координатных направлений	Ось 2 или нормаль к m вдоль диагональных направлений
Кубическая	Координатные элементы симметрии (X, Y, Z)	3 (всегда есть четыре оси с $n=3$)	Диагональные элементы симметрии

Кристаллы высшей категории. В символике точечной группы высшей категории (кубической сингонии) цифра 3 на второй позиции указывает на

наличие четырех осей симметрии 3-го порядка, в отличие от цифры 3 на первой позиции, символизирующую одну особенную ось 3, как это имеет место в кристаллах гексагональной сингонии. Наличие четырех осей 3, проходящих по биссектрисам координатных углов, характерно для всех классов кубической сингонии, где оси симметрии 4 всегда совпадают с осями координат. Так, запись $m\bar{3}$ означает: четыре оси симметрии с $n = 3$ расположены по биссектрисам координатных углов и три координатные плоскости симметрии. Запись же $3m$ означает, что в данном кристалле имеется ось симметрии третьего порядка, направленная по оси $Z - 3_Z$, а также три плоскости симметрии, проходящие через эту ось.

В символике Бравэ обозначают: P - плоскость симметрии, C - центр симметрии, L_n - ось симметрии n -того порядка, L_{in} - инверсионная ось симметрии. В символе класса симметрии записываются все оси (от высших к низшим), затем перечисляются плоскости и в конце центр инверсии. Символ группы оказывается длинным, но это исключает ошибку в наличие или отсутствии какого-либо элемента симметрии. Потому символику Бравэ называют еще учебной.

В символике Шенфлиса используют следующие базовые символы: C_n - ось симметрии, D_n - ось симметрии n -того порядка и n штук осей второго порядка, перпендикулярных C_n . Z - ось симметрии высшего порядка. Нижние индексы v , h и d у обозначений осей симметрии означают наличие у этих осей плоскостей симметрии: v - вертикальных, h - горизонтальных, d - диагональных к C_n , D_n . Так, символ D_{nh} означает - ось симметрии n -того порядка с перпендикулярными осями симметрии второго порядка и перпендикулярная к C_n плоскость симметрии. Базовый символ T означает наличие в кристалле осей симметрии кубического тетраэдра, O - осей симметрии кубического октаэдра. Еще один базовый символ символики

Шенфлиса S_n означает наличие в симметрии кристалла зеркальной оси n -того порядка - оси симметрии и перпендикулярной ей плоскости симметрии.

Символика Шубникова основана на международной символической, дополняя ее в деталях. В настоящее время не используется.

3.9. Составление и расшифровка стереографической проекции кристалла

Стереографическая проекция кристаллов широко используется при решении задач кристаллографии и кристаллофизике. Для того чтобы научиться составлять и читать стереографическую проекцию конкретной точечной группы симметрии кристалла, рассмотрим примеры проекций кристаллов различных симметрий кубической сингонии.

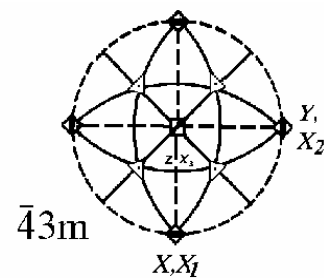


Рис.11

На рис.11 приведена стереографическая проекция точечной группы $\bar{4}3m$. Здесь пунктирная окружность - след от сферы проекций на экваториальную плоскость; X, Y, Z - оси кристаллографической системы координат; X_1, X_2, X_3 - оси кристаллофизической системы координат (с ней познакомимся позже). В кубической сингонии они совпадают. По оси X_3 направлена ось инверсионной симметрии четвертого порядка, на что светлый четырехугольник в центре фигуры. Инверсионные оси четвертого порядка находятся также на координатных осях X_1 и X_2 (светлые четырехугольники находятся на вертикальной и горизонтальной осях). Сплошными линиями на рисунке показаны плоскости симметрии, которые в данном случае направлены по диагоналям между осями координат X_1 и X_2 (две прямые линии), а также по плоскостям, проходящим через оси X_1 и X_2 и диагоналям противоположных

граней куба (на рис. 11 это два пересекающихся эллипса). В данной фигуре имеются также оси симметрии третьего порядка, которые направлены по пространственным диагоналям куба и которые на рисунке показаны как зачерненные треугольники на пересечении с плоскостями симметрии. Эти точки пересечения являются углами куба. Указанные оси симметрии третьего порядка являются обычными (говорят «прямыми»), т.к. треугольники зачернены. В точечной группе $m\bar{3}m$ (рис.11) количество элементов симметрии значительно больше. По осям симметрии четвертого порядка (они отмечены зачерненным четырехугольником) координат направлены оси координат. Имеются также четыре оси симметрии третьего порядка, совпадающие с пространственными диагоналями куба. Оси симметрии второго порядка проходят через середины противоположных ребер куба и их число равно числу ребер, деленное на два, т.е. шести. Эти оси отмечены на рис.12 чечевицеобразными фигурами. В данной группе симметрии есть плоскости симметрии. Первая буква m в международном символе группы ($m\bar{3}m$) указывает на плоскости, расположенные в координатных плоскостях: X_1OX_3 , X_1OX_2 и X_2OX_3 и показанные на рисунке толстыми линиями по осям X_1 , X_2 и в виде окружности для случая плоскости X_1OX_3 . Вторая буква m в символе группы ($m\bar{3}m$) указывает на наличие плоскостей симметрии, расположенных по диагоналям в координатных плоскостях. Эти плоскости на стереографической проекции дают толстые линии, проходящие по диагоналям между X_1 , X_2 , а также вертикальный и горизон-

тальный эллипсы в центре рис.12, для плоскостей, проходящих через верхнее правое (левое) ребро и нижнее левое (правое) ребро и через центр фигуры.

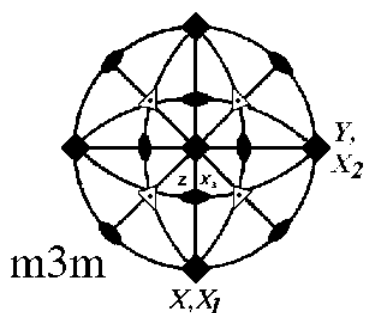


Рис.12

При рассмотрении элементов симметрии кристаллов низшей или средней категории необходимо иметь перед собой таблицу составления международного символа группы. Согласно ей по символу группы можно восстановить все порождающие элементы симметрии. Затем, применяя свойства элементов симметрии, восстановить другие элементы.

3.10. Вывод групп точечной симметрии кристаллов

Для того чтобы вывести все возможные точечные группы симметрии кристаллов, необходимо перебрать различные сочетания кристаллографических элементов симметрии, пересекающихся в одной точке. Последнее необходимо ввиду того, что рассматриваемые группы являются точечными.

Начнем рассмотрение с кристаллов **низшей и средней категорий**. Для них характерно наличие одного или нескольких особенных направлений. Возьмем в качестве исходного порождающего элемента симметрии ось симметрии, направим ее вдоль особенного направления и будем добавлять к ней другие элементы симметрии. При таком переборе элементов симметрии надо помнить:

- плоскость симметрии может проходить только вдоль выбранной оси или перпендикулярно ей. Во всяком другом случае ось симметрии, отразившись в плоскости, повторится, и тогда уже не будет единственной,

что противоречит исходному требованию к выбору этой оси как особенного направления;

- по этой же причине оси симметрии с $n = 2$ могут быть только перпендикулярны к выбранной оси. Других осей, перпендикулярных особенному направлению в кристаллах низшей и средней категориях, быть не может;

- центр симметрии может располагаться только на выбранной оси.

Все возможные сочетания элементов симметрии для низшей и средней категорий показаны на рис. 13. Заметим, что выбор в качестве основного элемента не оси симметрии, а плоскости симметрии принципиально не

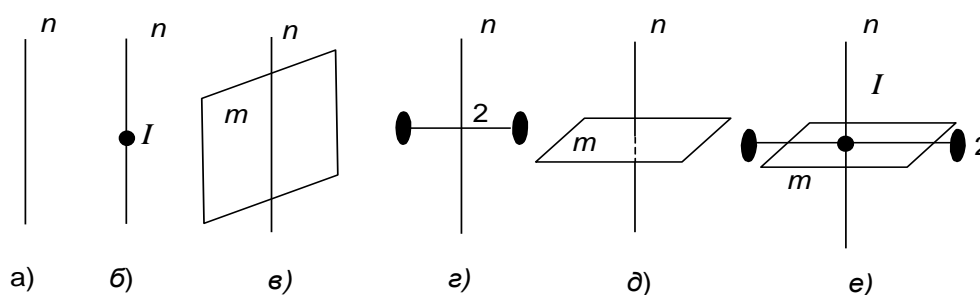


Рис.13

изменит число и вид возможных устойчивых сочетаний элементов симметрии. Теперь будем последовательно рассматривать полученные ситуации, каждая из которых будет определять свой набор групп точечной симметрии кристаллов с характерным для этих групп набором элементов симметрии.

Простейшие классы содержат один элемент симметрии: поворотную ось n -того порядка вдоль особенного направления (см. рис.13, а). Значит, по числу возможных осей симметрии возможны всего пять групп: 1 2 3 4 6.

Центральные классы (рис.13, б) получаются в результате добавления центра симметрии и использования второго свойства элементов симметрии.

<i>Порождающая ось</i>	1	2	3	4	6
<i>Порожденный элемент</i>	-	<i>m</i>	-	-	-
<i>Группа симметрии</i>	$\bar{1}$	$2/m$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$

Планальные классы получаются добавлением к оси симметрии плоскости симметрии, проходящей через ось (см. рис.13, в), и применения к полученному сочетанию элементов симметрии третьего свойства.

<i>Порождающая ось</i>	1	2	3	4	6
<i>Группа симметрии</i>	<i>m</i>	<i>mm2</i>	<i>3m</i>	<i>4mm</i>	<i>6mm</i>

Смысл записи *4mm*, *6mm* таков: на первом месте указан главный элемент симметрии - ось симметрии высокого порядка, на втором месте стоят координатные, на третьем - диагональные плоскости симметрии. Класс *mm2* имеет одну ось 2, направленную по оси *Z*, а также две плоскости симметрии, проходящие через эту ось.

Аксиальные классы получаются, если к порождающей оси добавить перпендикулярно ось симметрии 2 (см. рис.13, г).

<i>Порождающая ось</i>	1	2	3	4	6
<i>Группа симметрии</i>	2	222	32	422	622

Группа симметрии 2 уже встречался в простейших классах. Выделим ее цветом и не будем учитывать в дальнейшем. В символах 422, 622 на втором месте стоят оси 2, направленные по *X*, *Y*, а на третьем - оси порядка 2, направленные между координатными осями (например, по диагоналям в группе 422).

Добавляя к порождающей оси перпендикулярную плоскость симметрии *m* (рис.13, д), получим группы, среди которых есть уже встречавшиеся (выделены цветом):

<i>Порождающая ось</i>	1	2	3	4	6
<i>Группа симметрии</i>	<i>m</i>	$2/m$	$\bar{6}$	<i>4/m</i>	<i>6/m</i>

Здесь группа $3/m$ заменена на аналогичную ей группу $\bar{6}$.

Плاناксиальные классы получаются, если к порождающей оси добавить перпендикулярную плоскость m и плоскость, проходящую через ось симметрии, а также использовать третье и второе свойства элементов симметрии (объединив рис.13, в и рис. 13, д).

<i>Порождающая ось</i>	1	2	3	4	6
<i>Группа симметрии</i>	$mm2$	mmm	$\bar{3}/m$	$4/mmm$	$6/mmm$

Инверсионно-планальные классы получаются, если к порождающей оси добавить центр I , ось симметрии с $n = 2$, плоскость симметрии m , проходящую через ось и использовать третье и четвертое свойства элементов симметрии (рис.13, е).

Группа симметрии: $\bar{4}2m$ $\bar{6}m2$.

Таким образом, для кристаллов низшей и средней категорий имеем 27 точечных групп симметрии.

Перейдем к кристаллам **высшей категории**. У кристаллов этой категории нет особенных направлений, но имеется несколько осей симметрии порядка выше 2, пересекающихся в одной точке. Можно показать, что в этих условиях только два сочетания осей симметрии устойчивы (приводится без вывода): 4, 3, 2 и 3, 3, 2, которые соответствуют осям симметрии кубического тетраэдра и кубического октаэдра. Соответственно получаем две точечные группы симметрии кубической сингонии: класс 23 (оси симметрии кубического тетраэдра) и 432 (оси симметрии кубического октаэдра или куба), примитивный) и аксиальный, соответственно. Остальные группы кубической сингонии можно вывести, добавляя к указанным устойчивым сочетаниям осей симметрии центр симметрии или плоскость симметрии. Тогда получим еще три точечные группы симметрии: $\bar{4}3m$, $m\bar{3}$, $m\bar{3}m$. В итоге всего точечных групп оказалось 32.

Распределение кристаллов в природе по шести сингониям и 32 точечным группам исключительно неравномерно. Почти все металлы и сплавы

кристаллизуются в классе $m\bar{3}m$ или $6/m\bar{3}m$. Элементарные полупроводники (Si , Ge) кристаллизуются в классе $m\bar{3}m$, а другие - $\bar{4}3m$ кубической сингонии (структура типа сфалерита) или $\bar{6}m2$ гексагональной сингонии (структура типа вюрцита).

3.11. Пространственная симметрия структуры кристаллов

До сих пор рассматривалась симметрия элементарных ячеек кристаллов, их внешних форм. В данном параграфе анализируются симметричные свойства кристалла, рассматриваемого с позиций пространственной структуры, составленной из бесконечного числа элементарных ячеек.

Основное бесконечное симметрическое преобразование в кристалле - это трансляция, т.е. бесконечно повторяющийся перенос вдоль одной прямой на одно и то же расстояние, именуемое **периодом трансляции**, выбранного элемента: элементарной ячейки или другого объема. Ясно, что в трехмерном кристалле таких прямых может быть только три. Следовательно, группа пространственной симметрии кристалла должна включать в себя как минимум точечную группу симметрии и группу трансляционной симметрии. Однако один из постулатов группы утверждает, что если есть элементы группы a и b , то должен существовать «перекрестный» элемент $c=ab$ принадлежащий этой же группе. Здесь a – элемент точечной симметрии, b - одна из трех трансляций). Значит, сочетание трех элементов трансляционной симметрии кристалла с элементами симметрии точечных групп его элементарной ячейки приводит к образованию «перекрестных» элементов симметрии. Рассмотрим эти перекрестные элементы пространственной симметрии кристаллов. Из возможных произведений элементов симметрии интерес представляет произведение элемента трансляционной симметрии с

плоскостью симметрии и с осью симметрии n - того порядка. Значит, должны появиться два новых элемента симметрии.

Плоскость скользящего отражения.

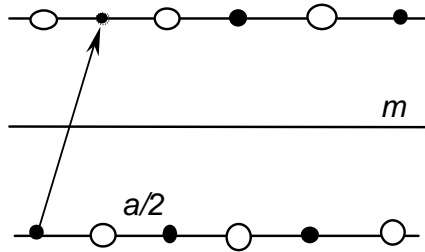


Рис.14

Произведение трансляции на операцию отражения в плоскости симметрии дает бесконечную операцию симметрии - преобразование с помощью плоскости скользящего отражения. Её действие поясняет рис.14. Здесь m – плоскость скользящего

отражения; a – период трансляции; ряды белых и черных точек – отображаемые объекты.

Плоскость скользящего отражения - это совокупность совместно действующих плоскости симметрии и параллельного ей переноса на величину, равную $1/2$ периода трансляции вдоль этой плоскости. Различие между плоскостью отражения и плоскостью скользящего отражения состоит в наличии

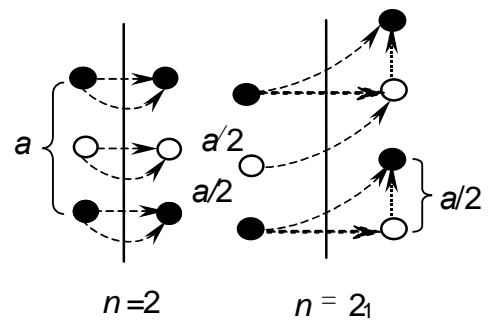


Рис. 15

переноса в последней операции. Скольжение может быть направлено не только вдоль векторов трансляции $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$, но и по диагоналям между векторами \bar{a}_1, \bar{a}_2 .

Винтовая ось симметрии. Следующая операция, включающая в себя трансляцию - это винтовой поворот, являющийся совокупностью совместно действующих поворота вокруг оси симметрии n – того порядка и трансляции на расстояние L вдоль оси. Ясно, что после полного поворота вокруг оси симметрии (на 360°) исходная точка совместится с аналогичной ей, но на удалении в один период трансляции. Примеры винтовой оси симметрии

шестого порядка - винт с шестигранной головкой.

Винтовые оси симметрии в кристаллах могут быть только порядков 2, 3, 4, 6. Винтовая ось обозначается цифрой, указывающей порядок оси симметрии n с нижним индексом t . Индекс может принимать значения 1, 2, ..., $(n-1)$ и показывает: на какую величину L от периода трансляции a вдоль оси симметрии производится перемещение объекта при повороте на минимальный угол $\alpha = 2\pi/n$: $L = \frac{t}{n}a$. Так, запись 2_1 означает, что при повороте вокруг оси симметрии второго порядка на угол 180° перенос будет равен величине $a/2$, где a - период трансляции вдоль оси симметрии. Действие винтовой оси симметрии второго порядка 2_1 показано на рис.15.

3.12. Решетки Бравэ. Пространственная группа симметрии кристалла

В предыдущем параграфе сделан вывод, что переход от симметрии элементарной ячейки к симметрии кристалла приводит к появлению новых элементов симметрии. В результате этого группа симметрии кристалла оказывается более полной, чем группа симметрии отдельной его элементарной ячейки. Для каждого кристалла характерен свой набор элементов трансляции или своя трансляционная группа. В зависимости от величин и ориентации векторов трансляции получаются решетки, отличающиеся друг от друга симметрией. Законы симметрии ограничивают число возможных трансляционных симметрий. Оказалось, что все кристаллические структуры описываются 14 трансляционными группами (приводится без вывода), соответствующими 14 решеткам Бравэ.

Решеткой Бравэ называется бесконечная система точек, которая образуется трансляционным повторением в пространстве одной или

нескольких точек. Решетки Бравэ отличаются друг от друга формой элементарных ячеек, их симметрией и подразделяются на 6 сингоний, рассмотренные ранее. Элементарные ячейки Бравэ выбираются так, чтобы число прямых углов и равных сторон было максимальным, а объем элементарной ячейки - минимальным.

Различают следующие типы решеток Бравэ: P - примитивные, I - объемноцентрированные, F - гранецентрированные, (A, B, C) - базоцентрированные, R - ромбоэдрические. Слово «центрирование» означает наличие дополнительного атома на соответствующей грани элементарной ячейки, в центре объема и т.д. Буквы A, B, C у базоцентрированных решеток показывают: A – наличие центрированных граней, перпендикулярных оси X, B - оси Y, C - оси Z.

Примитивные ячейки Бравэ - это ячейки, по которым различают сингонии. В этих решетках Бравэ узлы располагаются только в вершинах ячейки. В других ячейках Бравэ узлы есть и в других местах: в объемноцентрированных ячейках дополнительный один узел находится в центре ячейки, в гранецентрированных F-ячейках - по одному дополнительному узлу в центре каждой грани, в C-ячейках - по узлу в центре двух граней, перпендикулярные оси Z.

Установлено, что по 6 сингониям типы ячеек Бравэ распределены неоднородно. Всего возможно 14 возможных комбинаций, которые соответствуют 14 решеткам Бравэ.

Пространственной группой симметрии называется группа, образованная сочетанием всех возможных преобразований симметрии кристаллической структуры. Пространственная группа образуется из точечной группы симметрии и соответствующей по приведенной выше таблице трансляционной группы (решетки Бравэ). Каждой точечной группе может соответствовать несколько пространственных групп. Изображение

различных типов решеток Бравэ по сингониям показаны в Таблице 3 .

Таблица 4. *Распределение типов решеток Бравэ по сингониям*

N	Сингония / тип	P	I	F	A, B, C	R
1.	Триклинная	+				
2.	Моноклинная	+			+	
3.	Ромбическая	+	+	+	+	
4.	Тетрагональная	+	+			
5.	Гексагональная	+				+
6.	Кубическая	+	+	+		

Чтобы из пространственной группы получить точечную группу кристалла необходимо элементы симметрии, содержащие трансляции превратить в простые плоскости симметрии и в обычные оси симметрии. Обратная задача: из точечной группы вывести все ее пространственные группы кристалла - задача более сложная, поскольку необходимо перебрать все возможные сочетания элементов симметрии и решеток Бравэ. Так, если в точечную группу входят оси 3 и 2, то для вывода пространственной группы нужно перебрать все сочетания осей 3, 3₁, 3₂, 2, 2₁ и трансляций. Так, из 32-х кристаллических классов и 14 решеток Бравэ получается 230 пространственных групп. Международный символ пространственной группы составляется так, что на первом месте указывается тип решетки Бравэ, а затем порождающие элементы точечной симметрии.

4. ЭЛЕМЕНТЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО АППАРАТА

4.1. Кристаллофизическая система координат

Замечательное свойство кристаллографической системы координат - описывать кристаллографические направления и плоскости векторами с целочисленными компонентами - во многих разделах кристаллофизики является несущественным. Однако то обстоятельство, что компоненты вектора или тензора, характеризующего какое-либо физическое свойство (поляризуемость, электропроводность и т.д.), зависят от параметров элементарной ячейки кристалла, является ее серьезным недостатком. Более того, производить преобразования неортогональной системы координат, что часто требуется в задачах кристаллофизики, весьма затруднительно.

По этим причинам в кристаллофизике пользуются декартовыми системами координат, в которых все базисные вектора ортогональны между собой и имеют единичную длину. Такие базисы называют **ортонормированными** и обозначают $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3$

$$\bar{e}_i \cdot \bar{e}_j = \delta_{ij},$$

а это условие означает, что ковариантные компоненты метрического тензора определяются символами Кронекера:

$$g_{ij} = \bar{e}_i \cdot \bar{e}_j \text{ и } g_{ij} = \delta_{ij}.$$

Таким образом, для ортонормированного базиса матрица G совпадает с единичной матрицей, а основной базис совпадает с взаимным базисом:

$$\bar{e}_1 = \bar{e}^{(1)}, \bar{e}_2 = \bar{e}^{(2)}, \bar{e}_3 = \bar{e}^{(3)}.$$

Значит, контравариантные компоненты метрического тензора не отличаются от ковариантных и потому в дальнейшем будут только нижние индексы. Декартова система координат, ориентированная установленным образом относительно кристаллографической системы, называется

кристаллофизической системой координат.

При решении кристаллофизических задач часто оказывается удобна не исходная кристаллофизическая система координат, а другая система (но также декартовая). Так как декартовы координаты ортонормированы, то переход от одних декартовых координат к другим называется **ортогональным преобразованием**. Множество этих операций образуют группу $\infty\infty t$ - ортогональную группу (группа симметрии шара).

Пусть старая система координат X_1, X_2, X_3 построена на базисе $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3$, а новая - X'_1, X'_2, X'_3 на базисе $\bar{e}'_1, \bar{e}'_2, \bar{e}'_3$. Разложение орт новой системы координат по ортам старого базиса

$$\bar{e}'_i = C_{i'k} \bar{e}_k$$

определяется коэффициентами **матрицы ортогонального преобразования**:

$$\|C_{i'k}\| = \begin{vmatrix} C_{1'1} & C_{1'2} & C_{1'3} \\ C_{2'1} & C_{2'2} & C_{2'3} \\ C_{3'1} & C_{3'2} & C_{3'3} \end{vmatrix}.$$

Ее называют также матрицей косинусов, так как каждый ее элемент равен косинусу угла между соответствующими координатными осями. В п.3.5.3 учебного пособия подробно рассказано как производить преобразования системы координат.

4.2. Предельные группы симметрии (группы Кюри).

Принципы кристаллофизики

Ранее говорилось о том, что если кристалл обладает определенной симметрией, то и физические свойства этого кристалла должны иметь такую же симметрию: поскольку структура кристалла в определенных

направлениях одинакова, то одинаковыми должны быть в этих направлениях и его физические свойства. Однако нам известно, что полная симметрия кристалла описывается пространственной группой симметрии, которая складывается из элементов точечной симметрии, трех элементов трансляционной симметрии и набора «перекрестных» элементов симметрии. Относительно всех ли элементов пространственной группы симметрично физическое свойство кристалла? Оказывается, нет. Действительно, если необходимо измерить, например, электропроводность кристалла (он имеет идеальную решетку и бесконечные размеры по сравнению с измерительными площадками, к которым припаяны омические контакты), то, располагая измерительные контакты в любой точке торцов и сохраняя кристаллографическое направление измерения электропроводности, будем получать абсолютно одинаковые значения отыскиваемого физического свойства. Следовательно, трансляционная симметрия не должна входить в симметрию физического свойства. Поскольку в группу симметрии физического свойства не вошла трансляционная симметрия, то не войдут и перекрестные элементы симметрии как содержащие трансляцию.

Остаются только элементы точечной симметрии – именно относительно их должны быть симметричны физические свойства кристалла. Но из практического опыта известно, что некоторые свойства могут в кристаллических веществах обладать *изотропностью* (одинаковостью), т.е. их величина не зависит от направления его измерения. Описать же изотропность физического свойства (повторяемость при повороте на любой угол, в том числе на бесконечно малый) можно введением оси симметрии бесконечного порядка: $\alpha = 2\pi/n \rightarrow 0$, если $n \rightarrow \infty$.

Далее, кроме кристаллических веществ в электронной технике широко используются изотропные вещества, т.е. вещества, однородные по всем параметрам во всех направлениях. Если в группу симметрии кристалла

входят оси симметрии порядка 1, 2, 3, 4, 6, то в группы симметрии изотропных веществ должны также входить оси симметрии ∞ -ного порядка, поскольку в них поворот на произвольный угол (в том числе бесконечно малый) не изменяет ни структуру вещества, ни его физические свойства. Наличие такой оси отражает тот факт, что в плоскости перпендикулярной ей имеет место изотропность рассматриваемого физического свойства. Кроме того, оси симметрии порядка ∞ могут входить в группы симметрии физических полей: электрического, магнитного, упругого. Значит, должны существовать точечные группы симметрии, содержащие оси симметрии ∞ -ного порядка.

Точечные группы симметрии, в которые входят оси симметрии бесконечного порядка, называются предельными группами симметрии или группами Кюри. Таких групп семь и каждая из 32-х групп точечной симметрии кристаллов является подгруппой по меньшей мере одной из них. Так, например, предельная группа симметрии, характеризуемая одной осью симметрии ∞ -ного порядка, имеет кристаллографические подгруппы 1, 2, 3, 4, 6. Геометрические фигуры, характеризующие набор элементов симметрии для наиболее используемых предельных групп Кюри, показаны на рис. 16.

1. **Группа ∞ .** Данная группа симметрии состоит только из оси симметрии бесконечного порядка, т.е. оси с поворотом на произвольный угол. Геометрической фигурой, соответствующей данной точечной группе, является вращающийся вокруг оси конус. Ось симметрии бесконечного порядка проходит по оси конуса. Вращение фигуры необходимо для того, чтобы исключить бесконечное количество плоскостей симметрии, имеющих в покое конусе и проходящих через ось ∞ .

2. **Группа ∞m .** Покоящийся конус характеризуется точечной группой ∞m , т.е. осью ∞ и бесконечным числом плоскостей симметрии, проходящих через

эту ось. Ось симметрии ∞ в конусе - полярна. Полярное направление в кристалле характеризуется тем, что физическое свойство, измеренное в его прямом и обратном направлении, имеет разную величину. Такой симметрией обладает любое физическое свойство или внешнее воздействие, описываемое полярным вектором, например, электрическое поле, механическая сила и т.д. Ось симметрии ∞ -ного порядка совпадает с направлением силовых линий описываемого внешнего воздействия.

3. **Группа ∞/m .** Данная группа симметрии включает в себя одну ось симметрии бесконечного порядка и одну перпендикулярную ей плоскость симметрии. Характерной геометрической фигурой группы ∞/m является вращающийся вокруг своей оси в какую-либо сторону цилиндр. Вращение необходимо для того, чтобы исключить из группы плоскости симметрии, проходящие через ось покоящегося цилиндра. Ось симметрии бесконечного порядка направлена по оси цилиндра. Этой группе подчинены группы $6/m$, $4/m$, $2/m$, m , 6 , 4 , 3 , 1 . Симметрией ∞/m обладает любое физическое свойство, описываемое аксиальным вектором, например, однородное магнитное поле.

4. **Группа ∞/mmm .** Покоящийся цилиндр, а также цилиндр, растянутый или сжатый вдоль главной оси, характеризуется симметрией ∞/mmm , т.е. неполярной осью симметрии бесконечного порядка, бесконечным числом продольных плоскостей и одной перпендикулярной плоскостью, а также бесконечным числом поперечных осей порядка 2 и центром симметрии.

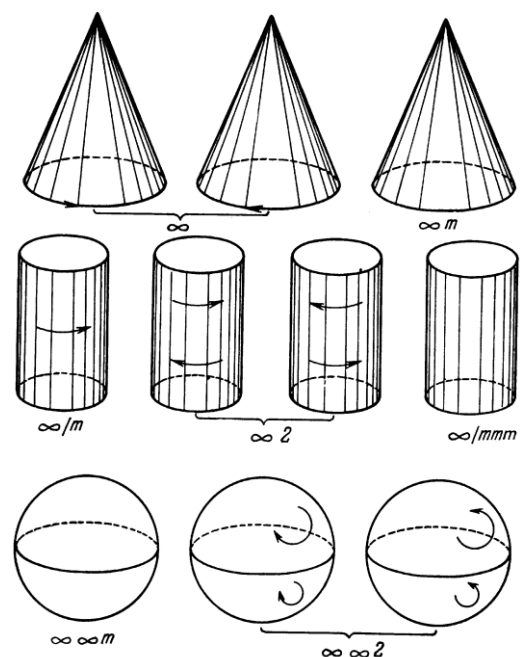


Рис.16

5. **Группа $\infty 2$.** Цилиндр, закрученный вдоль геометрической оси (вращение нижней части цилиндра противоположно вращению его верхней части), имеет симметрию $\infty 2$, т.е. неполярную ось ∞ и бесконечное число поперечных осей порядка 2. Вращение исключает бесконечное число продольных плоскостей, а его закручивание - плоскость симметрии, перпендикулярную оси цилиндра.

6. **Группа $\infty \infty m$.** Эта группа симметрии есть группа симметрии обыкновенного шара, в которой имеется бесконечное число осей ∞ -ного порядка и бесконечным числом плоскостей m . Она называется **ортогональной группой** и представляет собой группу с самым полным набором элементов симметрии.

7. **Группа $\infty \infty 2$** имеет набор элементов симметрии шара, у которого все радиусы вращаются: имеется бесконечное число осей ∞ -ного порядка, но нет плоскостей симметрии. Последние уничтожены в симметрии шара вращением радиусов. Группа $\infty \infty 2$ описывает симметрию процедуры преобразования системы декартовых координат и называется **группой вращения**.

Элементы симметрии имеют не только электрическое и магнитное поле. Одноосное растягивающее или сжимающее напряжение характеризуется группой ∞/mmm , механическое напряжение чистого сдвига - mmm , а всестороннее сжатие - группой $\infty \infty m$. Явление вращения плоскости поляризации (эффект Фарадея) характеризуется предельной группой $\infty \infty$.

Как же соотносятся группы симметрии физических свойств кристалла и его элементарной ячейки? На этот вопрос отвечает принцип Неймана: **группа симметрии физического свойства должна включать в себя точечную группу симметрии кристалла. Под симметрией физического свойства кристалла понимается симметрия тензорной поверхности, с помощью которой описывается данное свойство.** Из этого принципа следует, что

определенными физическими свойствами кристалл может обладать лишь тогда, когда точечная группа симметрии кристалла является подгруппой точечной группы симметрии рассматриваемого физического свойства. Например, спонтанной электрической поляризацией и пьезоэлектрическими свойствами могут обладать кристаллы, симметрия которых подчинена симметрии полярного вектора ∞m : 1, 2, 3, 4, 6, m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$. О какой же точечной группе кристалла идет здесь речь? Об исходной или о группе симметрии, которая получается у кристалла под воздействием? Ответ на этот вопрос таков: о второй. Действительно, если кристалл подвергается, например, периодическому сжатию растяжению вдоль заданного направления. В течение всего времени наблюдения исследуемого физического свойства кристалл будет находиться под воздействием: исходная, например, кубическая симметрия преобразуется в тетрагональную симметрию. Только в отдельные моменты прохождения упругого напряжения через нуль при смене знака симметрия кристалла будет описываться исходной точечной группой симметрии – кубической. Таким образом, **в принципе Неймана точечная группа симметрии кристалла берется такой, какой она становится при внешнем воздействии, необходимом для наблюдения рассматриваемого физического свойства.**

Как же определить симметрию кристалла при внешнем воздействии и как быть, если воздействий несколько? Ответ на этот вопрос даёт принцип Кюри: **когда несколько явлений природы накладываются друг на друга, образуя единую систему, их диссимметрии (отсутствие элемента симметрии) складываются. В результате в результирующем явлении остаются только те элементы симметрии, которые являются общими для каждого явления, взятого в отдельности.**

При практическом использовании принципа Кюри важным является взаимная ориентация элементов симметрии складываемых явлений

(например, кристаллов и воздействий на них), так что сочетание одних и тех же элементов в разных ориентациях может дать несовпадающие между собой наборы общих элементов симметрии. Так, если на кристалл наложить параллельно электрическое и магнитное поля, то точечная группа симметрии такого воздействия будет ∞ . Если поля взаимно перпендикулярны, то группа симметрии результирующего воздействия будет m .

4.3. Тензоры первого ранга

4.3.1. Полярные векторы

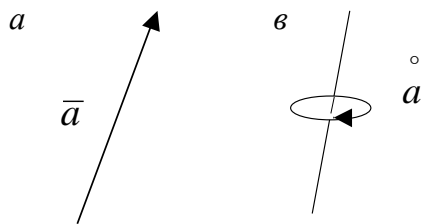


Рис. 17

Как в классической физике, так и в кристаллофизике для описания внешнего на кристалл воздействия и его реакции на возмущение широко используются полярные векторы. На рисунках их изображают в виде стрелки, направление

которой указывает направление действия или реакции, описываемых полярным вектором, а длина характеризует абсолютное значение (рис.17, *a*). С точки зрения тензорного исчисления скалярные величины являются тензорами нулевого ранга, полярные векторы являются тензорами первого ранга, т.к. для их задания требуется указать три числа. Группа симметрии полярного вектора – это группа ∞m , в которой ось симметрии бесконечного порядка совпадает с направлением вектора, а бесконечное количество плоскостей симметрии проходят через эту ось.

Отличие тензора от матриц различной размерности состоит в том, что тензор действует в заданной системе координат и характеризует величину описываемого им физического свойства. При смене системы координат, описываемой матрицей преобразования $C_{i'k}$, компоненты полярного тензора

первого ранга в новой системе координат T'_i выражаются через компоненты тензора T_k в старой системе следующим образом:

$$T'_i = C'_{ik} T_k. \quad (4.1)$$

Выполнение закона преобразования (4.1) является обязательным условием для того, чтобы рассматриваемый математический объект представлял собой полярный тензор.

3.3.2. Аксиальные векторы

Наряду с полярными векторами в физике широко применяются и другие векторы, которые описывают вращение вокруг некоторой оси: поворот, угловую скорость, напряженность магнитного поля и т.д. Они характеризуют не величину и направление действия, как полярные векторы, а величину и направление вращения вокруг оси и потому изображаются в виде отрезка прямой, направленной параллельно оси вращения, с указанием направления вращения. Длина отрезка прямой линии, изображающей аксиальный вектор, равна абсолютной величине отображаемого свойства. Такие векторы называют **аксиальными** (см. рис.17,в).

Аксиальные векторы отличаются от полярных векторов группой симметрии: у аксиальных она ∞/m , т.е. в группе точечной симметрии аксиального вектора

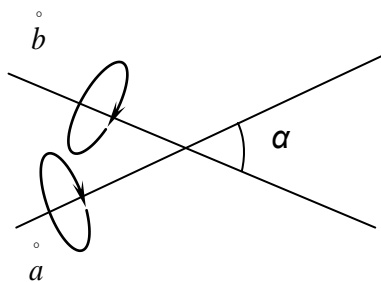


Рис.18

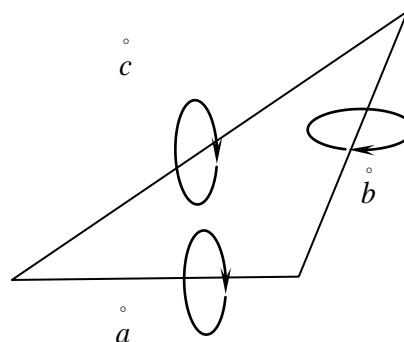


Рис.19

содержится центр симметрии. Действительно, среди осей вращения в оси бесконечного порядка содержится ось симметрии второго порядка. Тогда согласно третьему свойству элементов симметрии точка пересечения этой оси и плоскости симметрии является центром симметрии. Аксиальные векторы, как и полярные, можно складывать, умножать скалярно и векторно. Рассмотрим некоторые математические операции с аксиальными векторами.

1. Сложение аксиальных векторов. Если пересекаются два аксиальных вектора, то из двух получившихся углов углом между аксиальными векторами называют тот, при повороте на который одного из них векторов оба вектора совместятся и будут иметь одинаковое направление вращения. Так в ситуации, показанной на рис. 18, углом между аксиальными векторами \vec{a} и \vec{b} будет угол α . При сложении двух аксиальных векторов по методу треугольника (см. рис. 19) аксиальные вектора \vec{a} и \vec{b} совмещают концами так, чтобы направление вращения векторов было одинаковым. В суммарном векторе $\vec{c} = \vec{a} + \vec{b}$ направление вращения должно совпадать с вращением в складываемых векторах.

2. Умножение на константу. При умножении аксиального вектора на число λ его длина увеличивается или уменьшается в λ - раз. Направление вращения не изменяется, если $\lambda > 0$ и меняется на обратное, если $\lambda < 0$. Физический смысл этой операции заключается в увеличении, например, величины магнитного поля, частоты вращения и т.д.

3. Скалярное произведение двух аксиальных векторов равно произведению их длин на косинус угла

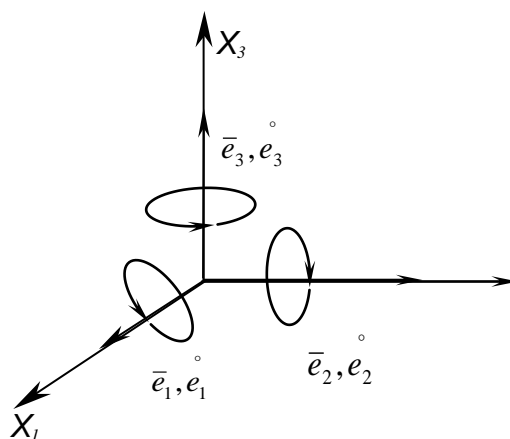


Рис.20

между ними: $(\overset{\circ}{a} \cdot \overset{\circ}{b}) = a \cdot b \cdot \cos \alpha$. Как и в случае полярных векторов, эта операция дает проекцию одного аксиального вектора (одного вращения) на другой (на другое вращение).

4. Введение аксиального базиса.

Задание скалярного произведения позволяет ввести ортонормированный аксиальный базис $\overset{\circ}{e}_1, \overset{\circ}{e}_2, \overset{\circ}{e}_3$, состоящий из взаимно ортогональных (в смысле направления осей вращения) векторов, так что $(\overset{\circ}{e}_i \cdot \overset{\circ}{e}_j) = \delta_{ij}$. Поэтому любой аксиальный вектор $\overset{\circ}{l}$ можно разложить по этому базису так, что: $\overset{\circ}{l} = l_k \overset{\circ}{e}_k$.

5. Введение полярно-аксиального базиса. В задачах кристаллофизики аксиальные векторы применяются наравне с полярными векторами и поэтому им необходим общий базис - полярно-аксиальный. За основу такого базиса может быть взят только полярный базис, т.к. аксиальный в группе своей точечной симметрии содержит центр симметрии, что недопустимо по отношению к полярным векторам: центр симметрии совместит в полярном векторе прямое и обратное направления, что уничтожит полярный вектор. Если есть ортонормированный полярный базис: $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3$, то на нем можно построить аксиальный базис $\overset{\circ}{e}_1, \overset{\circ}{e}_2, \overset{\circ}{e}_3$, совместив одноименные векторы (см. рис.20). При этом вращение во всех аксиальных векторах необходимо задать одинаковое, например: глядя из начала координат вдоль любого из трех полярных векторов \bar{e}_i , вращение в одноименном аксиальном векторе $\overset{\circ}{e}_i$ должно происходить по часовой стрелке.

Таким образом, полярные и аксиальные вектора могут сосуществовать в общей системе координат. Поэтому возможны совместные математические операции над полярными и аксиальными векторами: скалярное и векторное

произведения между ними, определяемые аналогично случаю полярных векторов и т.д. Ввиду того, что эти операции необходимы в разделах кристаллофизики, рассмотрим их.

6. Скалярное произведение полярного вектора на аксиальный равно произведению модулей этих векторов, умноженное на косинус угла между ними. Углом между полярным и аксиальным векторами называется угол, на который надо довернуть один из перемножаемых векторов до совмещения с другим, чтобы получился такой же винт, что и координатный.

7. Векторное произведение двух аксиальных векторов дает аксиальный вектор, равный по модулю произведению модулей перемножаемых векторов, умноженному на синус угла между ними. Угол между аксиальными векторами определяется при их совмещении. Результирующий аксиальный вектор направлен перпендикулярно обоим аксиальным векторам и имеет вращение, определяемое координатным винтом, если синус положителен, и противоположное направление вращения, если синус отрицателен.

8. Векторное произведение аксиального вектора \vec{a} на полярный вектор \vec{p} есть полярный вектор $\vec{q} = [\vec{a} \times \vec{p}]$ длиной $q = a \cdot p \cdot \sin \alpha$ (рис.21), перпендикулярный к перемножаемым векторам и направленный так, как была бы направлена нормальная к вектору \vec{a} составляющая \vec{p}_\perp вектора \vec{p} после поворота на 90° вокруг вектора \vec{a} в направлении его вращения.

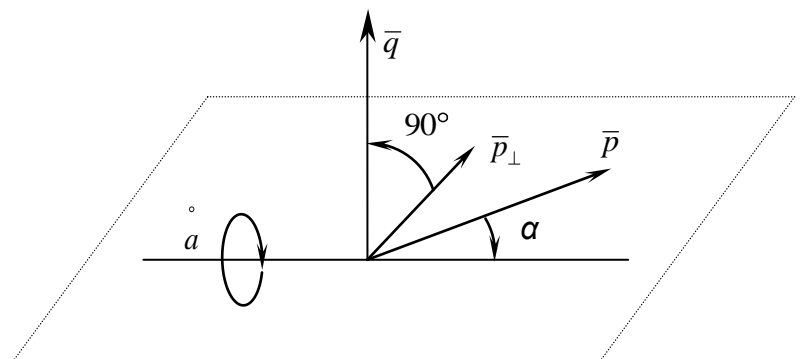


Рис..21

В заключение параграфа добавим, что если полярный тензор нулевого ранга - это скаляр, т.е. реальная

часть комплексного числа, то псевдотензор нулевого ранга – его мнимая часть. Далее, с точки зрения тензорного анализа векторы являются тензорами первого ранга. Поэтому по аналогии с полярными тензорами в кристаллофизике вводят аксиальные тензоры. Для удобства их называют **псевдотензорами**, а полярные тензора – **прямыми тензорами**. При смене системы координат, описываемой матрицей преобразования C'_{ik} , компоненты аксиального тензора первого ранга в новой системе координат A'_i выражаются через компоненты тензора A_k в старой системе следующим образом:

$$A'_i = \det(C'_{ik}) \cdot C'_{ik} A_k. \quad (4.2)$$

Таким образом, в отличие от закона преобразования полярного вектора (4.1) при смене системы координат новые компоненты аксиального вектора умножаются на определитель матрицы преобразования – выражение (4.2). Поэтому если проведенное преобразование системы координат относится к преобразованиям первого рода (вращение вокруг оси), то компоненты полярного и аксиального тензора преобразуются по одинаковым законам. Если же преобразование системы координат – преобразование второго рода (отражение), то компоненты аксиального вектора умножаются еще на «-1».

Выполнение закона преобразования в форме (4.2) является обязательным условием для того, чтобы рассматриваемый математический объект представлял собой псевдотензор.

4.4. Тензоры второго ранга

4.4.1. Основные положения теории

Как показывает практический опыт, описать все физические явления в кристаллах только тензорами нулевого и первого ранга невозможно. Во

многих задачах кристаллофизики приходится вводить тензора боле высокого ранга. Покажем на конкретном примере, как в задачах кристаллофизики может потребоваться тензор второго ранга.

Пусть требуется определить электропроводность кристаллического образца. Для её вычисления воспользуемся законом Ома: $j = \sigma E$. Свяжем с данным кристаллом систему координат, ориентируя её, например, по граням кристалла, и начнём с измерения электропроводности вдоль оси X_1 . Для этого изготовим омические контакты к X_1 - торцам образца, подключим к ним амперметр. Если теперь приложить электрическое поле вдоль оси X_1 , то по найденному току можно вычислить электропроводность вдоль этой оси при X_1 - ориентации электрического поля. Обозначим эту электропроводность как σ_{11} . Однако в кристалле в силу того, что в его объеме имеется поляризация \bar{P} , вызванная внешним электрическим полем \bar{E} , вектор электрической индукции $\bar{D} = \bar{E} + 4\pi\bar{P}$ ориентирован в общем случае по всем трем осям координат, даже если вектор \bar{E} направлен строго по одной из осей. Это делает возможным возникновение тока по оси X_1 также в случае воздействия поля вдоль осей X_2 и X_3 . Вычисляемые в этих случаях электропроводности σ_{12} и σ_{13} в общем случае будут иметь отличные от нуля значения: $j_{12} = \sigma_{12} E_2$, $j_{13} = \sigma_{13} E_3$. Таким образом, при произвольной ориентации электрического поля $\bar{E}(E_1, E_2, E_3)$ относительно кристаллографической системы координат величина тока вдоль оси X_1 характеризуется не одним значением, а тремя: j_{11} , j_{12} и j_{13} . Поэтому полный ток вдоль оси X_1 при произвольной ориентации поля будет $j_1 = \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3$. Он характеризуется тремя значениями электропроводности: σ_{11} , σ_{12} , σ_{13} .

Аналогичные ситуации будут иметь место при регистрации токов вдоль осей X_2 и X_3 : величины этих токов будут характеризоваться наборами чисел σ_{21} , σ_{22} , σ_{23} и σ_{31} , σ_{32} , σ_{33} , соответственно. Таким образом, при произвольной

ориентации электрического поля и регистрируемого тока относительно кристаллографической системы координат связь между ними описывают девять констант σ_{ij} , которые можно записать в виде матрицы

$$\|\sigma_{ij}\| = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix},$$

которая и является тензором второго ранга – тензором электропроводности.

Таким образом, тензор второго ранга представляет собой квадратную матрицу с числом элементов по строкам и столбцам, равным трем. Однако от матриц с аналогичным числом элементов тензор отличается тем, что численные значения его компонент относятся к заданной системе координат и определяют величину какого-либо физического свойства (электропроводность кристалла, удельное сопротивление кристалла, диэлектрическая проницаемость, магнитная проницаемость и другие) в выбранном направлении регистрации физического свойства при заданном направлении внешнего воздействия. Отличить тензор от матрицы можно по закону преобразования их компонент при смене системы координат: компоненты тензора в новой системе координат $T_{i'j'}$ связаны с компонентами тензора в старой системе T_{kl} соотношением

$$T_{i'j'} = C_{i'k} \cdot C_{j'l} \cdot T_{kl}, \quad (4.3)$$

где $C_{i'k}$ и $C_{j'l}$ - это компоненты матрицы преобразования системы координат. В приведённом выше выражении (4.3) подразумевается суммирование в правой части по индексам k и l , каждый из которых пробегает значения 1, 2, 3. Закон преобразования компонент в виде (4.3) можно рассматривать как определение тензора второго ранга.

Для понимания этого закона покажем на примере как вычисляется компонента $T_{1'1'}$ при смене системы координат. Согласно (4.3) компонента

тензора в новой системе координат представляет собой сумму из девяти слагаемых (полагаем $i' = j' = 1'$, а индексы k, l пробегают значения 1, 2, 3):

$$\begin{aligned}
 T_{1'1'} &= C_{1'k} C_{1'l} T_{kl} = C_{1'1}^2 T_{11} + C_{1'1} C_{1'2} T_{12} + C_{1'1} C_{1'3} T_{13} + \\
 &+ C_{1'2} C_{1'1} T_{21} + C_{1'2}^2 T_{22} + C_{1'2} C_{1'3} T_{23} + C_{1'3} C_{1'1} T_{31} + \\
 &+ C_{1'3} C_{1'2} T_{32} + C_{1'3}^2 T_{33}.
 \end{aligned}$$

Тензор второго ранга может быть симметричным, если $T_{kl} = T_{lk}$, т.е. недиагональные компоненты тензора, равноотстоящие от диагонали, равны друг другу и по величине, и по знаку. Если же тензор антисимметричен, то $T_{kl} = -T_{lk}$, т.е. недиагональные компоненты тензора, равноотстоящие от диагонали, равны по модулю и противоположны по знаку. Диагональные элементы антисимметричного тензора равны нулю.

Как и векторы, тензоры второго ранга могут быть полярными и аксиальными. Однако в силу особенностей исторического развития в настоящее время в кристаллофизике наиболее широко используются физические явления, описываемые полярными тензорами, а аксиальные тензоры применяются преимущественно в отдельных областях знаний, например, магнетизме. По этой причине дальнейшее изложение будет относиться к полярным тензорам. Распространить его на аксиальные тензоры не представляет труда.

4.4.2. Введение тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики

После того, как рассмотрен конкретный пример введения тензора второго ранга, перейдем к выяснению условий, приводящих к таким математическим объектам, используемым в кристаллофизике для описания физических свойств кристаллов, наблюдаемых в различных условиях. При

этом следует иметь в виду, что в линейном уравнении, описывающем следствие S физического воздействия на кристалл W

$$S = \mathfrak{F} \cdot W, \quad (4.4)$$

ранг тензора S левой части выражения (4.4), обязательно равен рангу правой части (4.4), представляющего собой свертку (суммирование по одинаковым индексам) тензоров физического свойства \mathfrak{F} и воздействия W и потому равного разности рангов тензоров \mathfrak{F} и W . Значит, если ранг воздействия и следствия будут равны единице, то ранг тензора \mathfrak{F} будет равен двум.

Подробно вопрос о введении тензоров второго ранга будет рассмотрен во второй части пособия в главе 8. Здесь же ограничимся анализом наиболее общих ситуаций, встречаемых при введении тензоров второго ранга.

Общим правилом, справедливым для всех рассматриваемых далее тензорах, является следующее: если тензор действует на линейную комбинацию векторных полей $\bar{U}^{(1)}$ и $\bar{U}^{(2)}$, то результат его действия равен сумме результатов от независимых действий тензора на каждое векторное поле в отдельности:

$$\hat{T}(\lambda \bar{U}^{(1)} + \mu \bar{U}^{(2)}) = \lambda \hat{T}(\bar{U}^{(1)}) + \mu \hat{T}(\bar{U}^{(2)}),$$

где λ и μ - любые вещественные числа. Это означает, что рассматриваемый тензор действует как линейный оператор, отображающий одно множество векторов на другое множество.

Рассмотрим специальные случаи линейных преобразований векторных множеств вида (4.4), производимых тензорами второго ранга, которые будут использоваться при дальнейшем рассмотрении:

1. Если векторы \bar{V} просто равны векторам \bar{U} , то связывающий их называется **единичным** и обозначается \hat{I} . В любой системе координат его

компоненты равны 1 или 0:

$$I_{kl} = \delta_{kl}.$$

2. Если векторы \bar{V} параллельны векторам \bar{U} и длиннее их в λ раз, то линейная зависимость \bar{V} от \bar{U} реализуется тензором $\lambda \hat{I}$. Тензоры такого вида называются **шаровыми**.

3. В векторной алгебре компонента вектора \bar{U} , параллельная некоторому заданному единичному вектору \bar{k} , может быть определена вычислением скалярного произведения: $\bar{k} \cdot \bar{U}$. В тензорной алгебре аналогичная операция записывается в виде: $\hat{k} \hat{k} \bar{U}$ и называется **диадой**. Если же в векторной алгебре требуется определить компоненту вектора \bar{U} , перпендикулярную вектору \bar{k} , то это можно сделать вычислением выражения: $\bar{U} - \bar{k} \cdot \bar{U}$. Эта запись предполагает, что вектор \bar{U} разлагается на сумму двух векторов, один из которых параллелен вектору \bar{k} , а другой перпендикулярен. Аналогично, проецирование тензоров второго ранга на плоскость, перпендикулярную к единичному вектору \bar{k} осуществляется тензором: $\hat{I} - \hat{k} \hat{k}$.

4. Как и всякую матрицу, тензор второго ранга можно транспонировать (поменять строки и столбцы местами). Если при этом тензор не изменяется

$\hat{T} = \hat{T}^*$, то он называется **симметричным**; в противном случае -

антисимметричным $\hat{T} = -\hat{T}^*$.

5. Любой тензор \hat{T} можно разложить на симметричную

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \left(\hat{T} + \hat{T}^* \right)$$

и антисимметричную части $\hat{A} = \frac{1}{2} \left(\hat{T} - \hat{T}^* \right)$.

Так, в развернутом виде разложение тензора второго ранга на симметричную и антисимметричную части будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{23} & T_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} T'_{11} & T'_{12} & T'_{13} \\ T'_{12} & T'_{22} & T'_{23} \\ T'_{13} & T'_{23} & T'_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & T''_{12} & T''_{13} \\ -T''_{12} & 0 & T''_{23} \\ -T''_{13} & -T''_{23} & 0 \end{vmatrix}.$$

В системе координат, построенной на собственных векторах, симметричная часть тензора представляет собой тензор диагонального типа с собственными значениями по диагонали. Остальные его компоненты равны нулю. В свою очередь выбором соответствующей системы координат антисимметричный тензор также может быть приведён к простейшему виду:

$$\begin{vmatrix} 0 & T'''_{12} & 0 \\ -T'''_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

Здесь ось с нулевыми компонентами называется **главной осью** и в приведённом примере она совпадает с осью X_3 .

Симметричная часть тензора, в свою очередь, разлагается на **шаровую (сферическую) часть**, каждый диагональный элемент которой вычисляется как треть суммы диагональных элементов симметричной части тензора

$$H_{ij} = \frac{1}{3} S_{kk} \cdot \delta_{ij},$$

и **девиатор**:

$$D_{ij} = S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \cdot \delta_{ij}.$$

В итоге любой тензор второго ранга \hat{T} можно представить в следующем виде:

$$\hat{T} = \hat{S} + \hat{A} = \hat{H} + \hat{D} + \hat{A}.$$

В заключение параграфа дадим физическую интерпретацию процедурам выделения симметричной и антисимметричной частей, шаровой части и девиатора тензора второго ранга.

Предположим, что в результате измерений физического свойства (например, электропроводности кристалла) получены численные значения компонент тензора второго ранга. Требуется выяснить физические механизмы, объясняющие полученные значения измеренного свойства. Стратегию объяснения строим по методу последовательных приближений.

Первый шаг. Сначала из полученного тензора выделяем симметричную и антисимметричную части. Это означает, что в своих объяснениях физических механизмов возникновения электропроводности ограничиваемся линейным приближением связи причины и следствия (электрического поля и плотности тока). При этом симметричная часть отражает существование физических механизмов возникновения электропроводности кристалла, дающих ток в том же направлении, что и действующее электрическое поле, а также электропроводности, не зависящей от перемены местами причины и следствия. Антисимметричная часть тензора отражает наличие физических механизмов электропроводности, дающих ток в перпендикулярном к полю направлении, причем перемена местами причины и следствия меняет направление следствия на обратное (ток течет в обратном направлении).

В зависимости от численных значений компонент симметричной и антисимметричной частей тензора можно приписать большее или меньшее влияние физическим механизмам, ответственным за симметричную и антисимметричную проводимость кристалла. В эксперименте большие значения антисимметричной части тензора могут свидетельствовать об отклонении траектории электронов от прямолинейной, например, за счет действия неконтролируемого магнитного поля или намагниченности кристалла, наведенной приложенным электрическим полем.

Второй шаг. Если в разбиении физических механизмов электропроводности кристалла на симметричную и антисимметричную части не удастся полностью понять механизм электропроводности, то возможно дальнейшее разбиение тензора путем выделения из симметричной части тензора шаровой части и девиатора. Такое разбиение на уровне физической модели кристалла означает, что анизотропный кристалл заменяется изотропной средой (с электропроводностью, равной компоненте шарового тензора) со свойством, описываемом шаровой частью тензора. В кристалле также имеются элементы анизотропной среды, описываемые элементами девиатора. Если окажется, что наибольшие значения имеют компоненты шаровой части, то это означает, что кристалл для данного физического свойства близок к изотропной среде.

Третий шаг. После того, как будет дано объяснение численным значениям компонент тензора (электропроводности) в приближении изотропной среды модель уточняется введением в рассмотрение анизотропии кристалла, что достигается учётом в физической модели роли девиатора тензора. Чем выше численные значения его компонент, тем ярче выражена анизотропия исследуемого физического свойства.

4.4.3. Собственные векторы и собственные значения тензора второго ранга

Для того чтобы лучше понять необходимость изучения этого вопроса, рассмотрим на конкретном примере действие полярного тензора второго ранга. Если тензор \hat{T} действует на векторное поле \bar{E} (представьте это поле как поле пшеницы, колоски которой как-то улеглись, образовав некоторую картину распределения направлений стеблей), то в соответствии с определением тензора $\bar{j} = \hat{T} \bar{E}$ это векторное поле преобразуется в другое

векторное поле \bar{j} . Действие тензора \hat{T} на поле векторов \bar{E} можно сравнить с действием ветра, который изменяет картину распределения стеблей пшеницы. Ясно, что второе поле – поле \bar{j} отличается от первого как одно поле пшеницы от другого - каждый вектор \bar{E} будет преобразован тензором \hat{T} . Однако, если сопоставить между собой векторные поля \bar{j} и \bar{E} , то можно обнаружить, что отдельные векторы \bar{j} , полученные из векторов \bar{E} , совпадают с исходными векторами по направлению - тензор не изменил их направления, хотя у всех других он это сделал. Вот эти векторы \bar{E} , которые не подверглись переориентации под действием тензора, называют **собственными векторами** тензора \hat{T} . Число S , указывающее во сколько раз изменилась длина собственного вектора \bar{E}_1 в результате действия на него тензора, называется **собственным значением** для вектора \bar{E}_1 . В трехмерном пространстве при решении физических задач число собственных векторов и собственных значений не может быть больше трех. Их находят из решения следующего векторного уравнения:

$$\bar{j} = \hat{T} \bar{E} \quad \text{или} \quad \hat{T} \bar{E} = S \cdot \bar{E}, \quad (4.5)$$

где S - число, а \hat{T} - тензор (матрица из девяти чисел). Собственные векторы и собственные значения можно найти из выражения (4.5), переписав его следующим образом:

$$\left(\hat{T} - I S \right) \bar{U} = 0,$$

В координатной форме записи это уравнение будет иметь вид:

$$\left(T_{ik} - S \cdot \delta_{ik} \right) U_k = 0$$

или в развернутом виде имеем систему:

$$\left(T_{11} - S \right) U_1 + T_{12} \cdot U_2 + T_{13} \cdot U_3 = 0,$$

$$T_{21} \cdot U_1 + (T_{22} - S) \cdot U_2 + T_{23} \cdot U_3 = 0,$$

$$T_{31} \cdot U_1 + T_{32} \cdot U_2 + (T_{33} - S) \cdot U_3 = 0.$$

Эта система из трёх однородных линейных уравнений относительно компонент вектора \vec{U} имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю:

$$\det(\hat{T} - S \cdot \hat{I}) = \begin{vmatrix} T_{11} - S & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} - S & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} - S \end{vmatrix} = 0.$$

Так как тензор \hat{T} задан, то имеем уравнение 3-ей степени для отыскания собственных значений S . Это уравнение называют **характеристическим уравнением**. По формулам Кардано уравнение третьей степени в общем случае имеет один вещественный корень и два комплексно-сопряженных. Последние два корня зачастую не поддаются физической интерпретации и потому желательно уйти от комплексного представления собственных значений. Это достигается применением следующей схемы расчета. Пусть вещественный корень каким либо способом найден. Назовём его третьим решением - $S = S_3$. Тогда из уравнения

$$(T_{ik} - S_3 \cdot \delta_{ik}) \cdot U_k = 0 \quad (k = 1, 2, 3)$$

находим один собственный вектор $\vec{U}^{(3)}$, являющийся по условию нормировки единичным. Этот вектор можно использовать как орт новой системы координат. Сделаем его ортом \vec{e}_3' , т.е. повернем старую систему координат так, чтобы в новой \vec{e}_3' , был осью X_3' (или Z'). В новой системе координат тензор \hat{T} будет

$$\|T_{j'j'}\| = \begin{vmatrix} T_{1'1'} & T_{1'2'} & 0 \\ T_{2'1'} & T_{2'2'} & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{vmatrix}.$$

Поэтому в новой системе координат характеристическое уравнение переписывается в виде:

$$\begin{vmatrix} T_{1'1'} - S & T_{1'2'} & 0 \\ T_{2'1'} & T_{2'2'} - S & 0 \\ 0 & 0 & T_{3'3'} - S \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрыв определитель, получим уравнение второго порядка, из которого найдем два других собственных значения:

$$S_{(1,2)} = \frac{1}{2} \cdot \left[(T_{1'1'} + T_{2'2'}) \pm \sqrt{(T_{1'1'} - T_{2'2'})^2 + 4 \cdot T_{1'2'}^2} \right].$$

Поскольку под корнем стоит положительное число, то оба найденных корня будут вещественными.

Собственные вектора, соответствующие различным собственным значениям, взаимно ортогональны. Действительно, умножая справа скалярно уравнение для определения собственных векторов на $\vec{U}^{(2)}$

$$\begin{aligned} \hat{T} \vec{U}^{(1)} = S_1 \cdot \vec{U}^{(1)} & \quad | \quad \vec{U}^{(2)} \\ \hat{T} \vec{U}^{(2)} = S_2 \cdot \vec{U}^{(2)} & \quad | \quad \vec{U}^{(1)} \end{aligned}$$

и вычитая одно из другого, получим:

$$\hat{T} \vec{U}^{(1)} \cdot \vec{U}^{(2)} - \hat{T} \vec{U}^{(2)} \cdot \vec{U}^{(1)} = 0 = (S_1 - S_2) \vec{U}^{(1)} \cdot \vec{U}^{(2)}, \quad (4.6)$$

откуда следует, что скалярное произведение $(\vec{U}^{(1)} \cdot \vec{U}^{(2)}) \neq 0$, т.е. $\vec{U}^{(1)} \perp \vec{U}^{(2)}$ (этот символ и символ « \parallel » здесь и далее означают взаимную перпендикулярность или параллельность векторов, соответственно) при $S_1 \neq S_2$. Левая часть выражения (4.6) представляет собой разность двух чисел, полученных в результате скалярного произведения двух векторов: вектора, преобразованного действием тензора, и одного из собственных векторов.

Если все собственные вектора тензора различны, то они образуют базис, в котором тензор принимает наиболее простой вид:

$$\hat{T} = S_1 \cdot \bar{U}^{(1)} \hat{\bar{U}}^{(1)} + S_2 \cdot \bar{U}^{(2)} \hat{\bar{U}}^{(2)} + S_3 \cdot \bar{U}^{(3)} \hat{\bar{U}}^{(3)},$$

а его матрица - ортогональную форму:

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{vmatrix}.$$

Здесь символ $\bar{U}^{(i)} \hat{\bar{U}}^{(i)}$ - обозначает диады собственных векторов. Когда два собственных значения совпадают ($S_1 = S_2$), то это означает, что этим значениям соответствует целая плоскость собственных векторов ($X_1 O X_2$), перпендикулярная $\bar{U}^{(3)}$. При совпадении всех трех собственных значений любой вектор является для такого тензора собственным.

4.4.4. Нормальные и тангенциальные составляющие тензора второго ранга

По аналогии с тем, что для любой геометрической поверхности в каждой ее точке можно построить нормальную и тангенциальную составляющие, такие же составляющие вводятся в рассмотрение для тензоров второго ранга.

Нормальной составляющей симметричного тензора второго ранга \hat{T} в направлении единичного вектора \bar{n} называется число

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = T_{ij} \cdot n_i \cdot n_j,$$

представляющее собой результат скалярного умножения вектора \bar{n} на вектор, полученный в результате преобразования тензором \hat{T} вектора \bar{n} . Если принять единичный вектор \bar{n} за один из ортов новой координатной

системы X_1, X_2, X_3 , ($\bar{n} = \bar{e}_1$), то нормальная составляющая в направлении вектора \bar{n} окажется просто соответствующей диагональной компонентой тензора в системе X_1, X_2, X_3 . В данном примере

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = T_{11}.$$

В системе координат, построенной на главных осях тензора, выражения для вычисления нормальной составляющей принимают наиболее простой вид:

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = S_1 \cdot n_1^2 + S_2 \cdot n_2^2 + S_3 \cdot n_3^2.$$

Если, в частности, два собственных значения совпадают, то его нормальная составляющая будет зависеть только от компоненты $n_3 = \bar{n} \cdot \bar{k}$:

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = S_{\perp} \cdot (1 - n_3^2) + S_{\parallel} \cdot n_3^2 = S_{\perp} + (S_{\parallel} - S_{\perp}) \cdot n_3^2,$$

где обозначено: $S_{\parallel} = S_3$, $S_{\perp} = S_1 = S_2$. Наконец, если все три собственных значения тензора совпадают, то нормальная составляющая такого тензора одинакова для любого направления в пространстве и равна:

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = S, \quad S = S_1 = S_2 = S_3.$$

В чем же польза от введения собственных векторов и собственных значений тензора? В кристаллофизике часто возникает задача по определению направления вектора \bar{n} , при котором нормальная составляющая данного тензора \hat{T} принимает экстремальные значения. При этом предполагается, что тензор \hat{T} задан своими компонентами T_{ij} в системе координат X_1, X_2, X_3 .

Математическая формулировка этой задачи такова: найти значения n_i , при которых достигает экстремума функция $F(\bar{n}) = \bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} = T_{ij} \cdot n_j \cdot n_j$ при

условии, что $f(\vec{n}) = \vec{c} \cdot \vec{n} - 1 = 0$. Это типичная задача по отысканию условного экстремума, которая обычно решается методом неопределенных множителей Лагранжа. Для этого составляется новая функция

$$\Phi(\vec{n}) = F(\vec{n}) - \lambda \cdot f(\vec{n})$$

с неопределенным множителем λ , у которой ищут безусловный экстремум, приравнявая к нулю частные производные:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = 0.$$

Затем из этих уравнений и условия $f(\vec{n}) = 0$ находят компоненты n_i и множитель λ :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = \frac{\partial F}{\partial n_i} - \lambda \cdot \frac{\partial f}{\partial n_i} = T_{ij} \cdot n_j + T_{ji} \cdot n_j - 2 \cdot \lambda \cdot n_i = 0$$

или с учетом симметричности тензора \hat{T} : $T_{ij} \cdot n_j = \lambda \cdot n_i$, а это есть условие того, что вектор \vec{n} является собственным вектором тензора, а λ - соответствующее ему собственное значение.

Таким образом, **нормальная составляющая тензора достигает экстремальных значений в направлениях, совпадающих с направлением собственных векторов этого тензора. Более того, эти экстремальные значения равны соответствующим собственным значениям тензора.** Действительно, по определению нормальной составляющей

$$\left(\vec{n} \cdot \hat{T} \vec{n} \right) = T_{ij} \cdot n_i \cdot n_j = \lambda \cdot n_j \cdot n_j = \lambda.$$

Отсюда же следует, что если все собственные значения тензора положительны (отрицательны), то и все его нормальные составляющие положительны (отрицательны). Будучи непрерывной функцией направления, они могут обратиться в нуль, если нормальная составляющая принимает положительные и отрицательные значения.

Нормальная составляющая тензора равна величине физического свойства, описываемого данным тензором, в направлении вектора \bar{n} .

Перейдем к рассмотрению тангенциальных составляющих симметричного тензора второго ранга. Пусть \hat{T} - тензор второго ранга, а \bar{p} и \bar{q} - взаимно перпендикулярные единичные вектора:

$$\bar{p} \cdot \bar{p} = 1, \quad \bar{q} \cdot \bar{q} = 1, \quad \bar{p} \cdot \bar{q} = 0.$$

Тангенциальной составляющей тензора \hat{T} в направлениях векторов \bar{p} и \bar{q} называется число:

$$\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q} \right) = T_{ij} \cdot p_i \cdot q_j,$$

представляющее собой результат скалярного умножения вектора \bar{p} и преобразованного тензором \hat{T} вектора \bar{q} . Так как рассматриваемый тензор \hat{T} симметричен, то направления \bar{p} и \bar{q} абсолютно равноправны и взаимозаменяемы. Пользуясь тем, что единичные векторы \bar{p} и \bar{q} взаимно перпендикулярны, на них можно построить новую систему координат X_1, X_2, X_3 , орты которой равны:

$$\bar{e}_1 = \bar{p}, \quad \bar{e}_2 = \bar{q}, \quad \bar{e}_3 = \bar{p} \times \bar{q}.$$

В новой системе координат тангенциальная составляющая тензора второго ранга будет равна:

$$\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q} \right) = T_{1'2'}.$$

Отсюда следует вывод, что если нормальные составляющие тензора соответствуют его диагональным компонентам, то тангенциальные составляющие есть его недиагональные элементы.

В системе координат, построенной на собственных векторах тензора, тангенциальные составляющие выражаются следующим образом:

- в общем случае: $\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q}\right) = S_1 \cdot p_1 \cdot q_1 + S_2 \cdot p_2 \cdot q_2 + S_3 \cdot p_3 \cdot q_3$;
- при совпадении двух собственных значений: $\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q}\right) = (S_{||} - S_{\perp}) p_3 \cdot q_3$;
- при совпадении трех собственных значений: $\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q}\right) = 0$.

4.4.5. Указательная и характеристическая поверхности тензора второго ранга

Каждый тензор можно представить в наглядной форме, нарисовав его в трехмерном пространстве как геометрическую фигуру, поверхность. Существует два способа отображения тензора в виде пространственной фигуры (поверхности).

Указательная поверхность. Первый способ заключается в следующем: каждому тензору второго ранга \hat{T} с компонентами T_{kl} ставится в соответствие указательная поверхность второго порядка в пространстве $X_1 X_2 X_3$, которая определяется следующим образом: радиус-вектор r , откладываемый из начала координат до любой точки указательной поверхности, равен величине физического свойства $r = T_{kl} n_k n_l$. Она строится следующим образом. Перебираются все возможные направления единичного вектора $\bar{n} (n_1, n_2, n_3)$ в пространстве и для каждого из них вычисляется величина физического свойства в данном направлении. Затем, из начала координат в направлении выбранного единичного вектора откладывается отрезок длиной r , равной величине физического свойства. Концы отрезка r опишут в пространстве некоторую поверхность, которая называется

указательной. Симметрия указательной поверхности отражает симметрию рассматриваемого физического свойства.

Простой пример указательной поверхности: в изотропной среде указательная поверхность представляет собой сферу, т.к. величина физического свойства одинакова во всех направлениях.

Характеристическая поверхность. Вторым способом заключается в следующем: другая поверхность тензора строится как поверхность равного свойства и определяется выражением:

$$T_{ij} X_i X_j = 1$$

и называется **характеристической поверхностью**. Это поверхность второго порядка, которая хорошо известна из курса высшей математики. В системе координат, построенной на собственных векторах данного тензора, вид характеристической поверхности предельно упрощается, т.к. в этом случае у тензора оказываются отличными от нуля только диагональные элементы, которые равны собственным значениям S_1, S_2, S_3 . Таким образом, уравнение характеристической поверхности будет иметь следующий вид

$$T_{ij} X_i^2 = S_{11} X_1^2 + S_{22} X_2^2 + S_{33} X_3^2 = 1,$$

где $S_{11} = S_1, S_{22} = S_2, S_{33} = S_3$. Возможные варианты видов характеристической поверхности ограничены и определяются величинами собственных значений тензора S_1, S_2, S_3 :

- * если значения S_1, S_2, S_3 положительны и не совпадают между собой, то характеристическая поверхность - это эллипсоид общего вида;
- * если значения S_1, S_2, S_3 положительны и два из них равны друг другу: $S_1=S_2$, то характеристическая поверхность – это эллипсоид вращения;
- * если собственные значения S_1, S_2, S_3 положительны и равны $S_1=S_2=S_3$, то характеристическая поверхность имеет форму сферы;
- * если два собственных значения положительны, а третье отрицательно,

то характеристическая поверхность - однополостной гиперboloид;

- * если два собственных значения отрицательны, а третье положительно, то характеристическая поверхность - двуполостной гиперboloид;
- * если все три собственных значения S_1, S_2, S_3 отрицательны, то характеристическая поверхность - мнимый эллипсоид.

4.5. Тензоры высших рангов

4.5.1. Введение тензоров высших рангов в задачах кристаллофизики

Как показывает опыт, оказывается невозможным описать все известные и вновь открываемые физические явления в кристаллах, пользуясь только тензорами первого и второго ранга. Поэтому наряду с тензорами первого и второго ранга в кристаллофизике применяются тензора высших рангов: третьего, четвёртого и т.д. Основных способов их введения два.

1. Физическое явления по своей сути является низкоранговым (нулевого, первого или второго ранга), но из-за сложных условий его наблюдения имеется компонента измеряемого свойства, которая описывается тензором высокого ранга (выше второго). Например, исследуется электропроводность кристалла – свойства второго ранга. Исследуемый кристалл помещен не только в электрическое поле, но и, например, магнитное. Утверждается, что в этих условиях в проводимости кристалла наряду с тензором второго ранга будет присутствовать компонента, описываемая тензором третьего ранга. Действительно, в указанных условиях можно считать, что

$$\bar{j} = \bar{j} \left(\bar{E}, \overset{\circ}{H} \right).$$

Предполагая малыми внешние воздействия, разложим эту зависимость в ряд по электрическому и магнитному полям вблизи их нулевых значений, и ограничимся первыми членами разложения:

$$\bar{j} \approx \bar{j}_0 + \left(\frac{\partial \bar{j}(0,0)}{\partial \bar{E}} \right) \bar{E} + \left(\frac{\partial \bar{j}(0,0)}{\partial \overset{\circ}{H}} \right) \overset{\circ}{H} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \bar{j}(0,0)}{\partial \bar{E} \partial \overset{\circ}{H}} \right) \bar{E} \cdot \overset{\circ}{H} + \dots \quad (4.7)$$

Первое слагаемое в выражении (4.7) описывает наличие электрического тока в отсутствие внешних полей. Ясно, что оно равно нулю: $\bar{j}_0 = 0$. Второе слагаемое описывает возникновение электрического тока в кристалле только за счет действия электрического поля. Коэффициенты линейной зависимости этого слагаемого образуют тензор второго ранга – тензор электропроводности. Третье слагаемое описывает эффект появления электрического тока (направленного движения заряженных частиц) в кристалле при воздействии на него только магнитного поля. Этот эффект описывается тензором (а точнее псевдотензором) второго ранга. Четвертое слагаемое в выражении (4.7) описывает эффект появления электрического тока в кристалле при одновременном действии на него электрического и магнитного полей. Эффект перекрестного влияния двух полей описывается уже тензором третьего ранга.

Ясно, что вариантов появления тензоров высших рангов по этому методу много и потому подробно они не рассматриваются.

2. Второй способ введения касается физического явления, которое принципиально не может быть описано тензором низкого ранга. Здесь возможны три варианта. Рассмотрим их подробно.

2.1. Пусть компоненты вектора \bar{P} линейно зависят от компонент тензора второго ранга:

$$P_l = d_{lmn} \cdot \sigma_{mn},$$

где d_{lmn} - коэффициенты этой линейной зависимости. Вектор \bar{P} и тензор $\hat{\sigma}$ можно отнести к новой системе координат. Если $\|C_{i'k}\|$ - матрица перехода от старой системы координат к новой, то компоненты вектора \bar{P} в новой системе координат будут равны:

$$P_{i'} = C_{i'k} P_k = C_{i'k} d_{klm} \sigma_{lm}. \quad (4.8)$$

Выразим значения компонент тензора σ_{lm} в старой системе координат через значения $\sigma_{j'k'}$ в новой системе:

$$\sigma_{lm} = C_{j'l} C_{k'm} \sigma_{j'k'}. \quad (4.9)$$

Подставив это в (4.8), получим:

$$P_{i'} = C_{i'l} d_{lmn} C_{j'm} C_{k'n} \sigma_{j'k'}.$$

Если в старых координатах линейная зависимость компонент вектора \bar{P} от компонент тензора $\hat{\sigma}$ определялась коэффициентами d_{lmn} , то в новой системе коэффициенты равны:

$$d_{i'j'k'} = C_{i'l} C_{j'm} C_{k'n} d_{lmn}. \quad (4.10)$$

Аналогичным образом выводятся формулы для изменения коэффициентов d_{lmn} при переходе от новой системы координат к старой системе:

$$d_{i'j'k'} = C_{i'l} C_{j'm} C_{k'n} d_{lmn}.$$

Законы преобразования (4.9) и (4.10) такие же, как и для произведений компонент трех векторов. Таким образом, в данном случае имеем дело с некоторой геометрической величиной $\hat{\sigma}$, которая в каждой системе координат характеризуется набором чисел d_{lmn} и которая при смене системы координат преобразуется как произведение компонент трех векторов. Такая величина называется **тензором третьего ранга**, а числа d_{lmn} - его компонентами.

2.2. К тензору третьего ранга можно прийти и другим способом: рассматривая линейную зависимость компонент тензора второго ранга ξ от вектора \bar{E} :

$$\zeta_{ik} = r_{ikl} E_l,$$

где компоненты r_{ikl} - тоже компоненты тензора третьего ранга.

Аналогичным образом можно ввести в рассмотрение тензоры четвертого, пятого и т.д. рангов. Например, коэффициенты S_{ijkl} , определяющие линейную зависимость компонент тензора σ_{ij} тензора ξ от компонент ε_{kl} тензора ξ :

$$\sigma_{ij} = S_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

есть компоненты тензора четвертого ранга ξ , коэффициенты Q_{ijklm} , определяющие линейную зависимость компонент S_{ijkl} тензора четвертого ранга ξ от компонент E_m вектора \bar{E} :

$$S_{ijkl} = Q_{ijklm} E_m$$

это компоненты тензора пятого ранга. Можно сформулировать общее правило: **коэффициенты линейной зависимости компонент тензора ранга r от произведения компонент тензоров ранга r_1, r_2, \dots, r_n сами являются компонентами тензора, ранг которого равен $r + r_1 + r_2 + \dots + r_n$.**

2.3. Другая операция, в результате применения которой образуются тензоры, дифференцирование тензоров по тензорам. Пусть, например, компоненты вектора \bar{P} - есть функции компонент тензора ξ . Введем обозначения для частных производных:

$$\frac{\partial P_i}{\partial \sigma_{jk}} = d_{ijk},$$

а частные производные в новой системе координат обозначим:

$$\frac{\partial P_{i'}}{\partial \sigma_{j'k'}} = d_{i'j'k'}.$$

Можно показать, что

$$d_{i'j'k'} = C_{i'i} C_{j'j} C_{k'k} d_{ijk},$$

что означает, что числа d_{ijk} являются компонентами тензора третьего ранга.

Аналогично рассматривается дифференцирование тензора по нескольким тензорам. В результате приходим к следующему общему выводу: **частные производные компонент тензора ранга r по компонентам тензоров рангов r_1, r_2, \dots, r_n есть компоненты тензора ранга $r + r_1 + r_2 + \dots + r_n$.**

Детальное рассмотрение способов введения тензоров третьего и четвертого ранга в задачах кристаллофизики будет приведено в главе 9 пособия.

Математические операции с тензорами. Как и с тензорами нулевого и первого рангов с тензорами высших рангов можно производить все известные математические операции. Рассмотрим наиболее употребляемые и важные для применения в кристаллофизике операции.

1. Умножение на число. Произведением тензора \mathfrak{A} с компонентами $A_{ij\dots k}$ относительно некоторого ортонормированного базиса на число λ называется тензор того же ранга $\lambda \mathfrak{A}$ с компонентами $\lambda A_{ij\dots k}$.

2. Сложение тензоров. Суммой двух тензоров одного и того же ранга \mathfrak{A} и \mathfrak{B} с компонентами $A_{ij\dots k}$ и $B_{ij\dots k}$ называется тензор \mathfrak{D} с компонентами

$$D_{ij\dots k} = A_{ij\dots k} + B_{ij\dots k}$$

Тензора разных рангов складывать нельзя, сначала надо выровнять ранги нулевыми строками, столбцами.

3. Образование изомеров. Переставив каким-либо способом индексы у тензора \hat{D} , получим тензор \hat{F} того же ранга, что и у тензора \hat{D} , который называют изомером тензора \hat{D} . В частности, в рассмотренном выше примере

умножения тензоров тензор $\hat{F} = \hat{B}\hat{A}$ является изомером тензора $\hat{D} = \hat{A}\hat{B}$. Количество изомеров у тензора ранга r будет равно $r! = 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (r-1) \cdot r$.

4. Симметрирование и альтернирование. Тензор \hat{B} называется **симметрированным** тензором \hat{A} , если он равен среднему арифметическому всевозможных изомеров тензора \hat{A} . Тензор \hat{D} называется **альтернированным** тензором \hat{A} если в упомянутом среднем арифметическом изомеры, полученные при четной перестановке индексов, брать со знаком плюс, а при нечетной - со знаком минус. Четной называется такая перестановка, в которой сумма порядковых номеров переставляемых индексов (счёт идёт слева направо) делится без остатка на два. Пример, если третий индекс ставится на первое место, то такая перестановка будет четной, т.к. $3+1=4$ делится на 2 без остатка.

Симметрирование и альтернирование обозначаются заключением индексов в круглые и квадратные скобки соответственно. Например:

$$B_{ijk} = A_{(ijk)} = \frac{1}{6} \cdot (A_{ijk} + A_{jki} + A_{kij} + A_{ikj} + A_{jik} + A_{kji})$$

$$D_{ijk} = A_{[ijk]} = \frac{1}{6} \cdot (A_{ijk} + A_{jki} + A_{kij} - A_{ikj} - A_{jik} - A_{kji})$$

Симметрировать и альтернировать возможно по части индексов. Пример симметрирования и альтернирования по части индексов:

$$A_{i(jk)} = \frac{1}{2} (A_{ijk} + A_{ikj}) \quad A_{i[\bar{j}\bar{k}]} = \frac{1}{2} (A_{ijk} - A_{jki})$$

Физическая интерпретация операции симметрирования заключается в том, что рассматриваемое свойство, описываемое тензором \hat{A} , в результате применения этой операции упрощается заменой его свойством симметричным по всем индексам, а альтернирование – заменой антисимметричным свойством. Эти операции в отношении тензоров высших

рангов аналогичны операциям выделения из тензора второго ранга симметричной и антисимметричной частей.

Координатная запись тензоров. По аналогии с записью вектора через его координаты и базисные вектора: $\vec{v} = v_i \cdot \vec{e}_i$, тензоры высших рангов также можно представить в координатной форме. В ряде случаев такая форма записи оказывается исключительно удобной. В этой форме, например, тензор третьего ранга имеет вид:

$$\vec{\mathcal{F}} = d_{ijk} \vec{e}_i \vec{e}_j \vec{e}_k.$$

Координатная запись умножения тензора на число и сложения тензоров пояснений не требует. Умножение тензоров обозначаем, записывая их рядом должным порядком чередования без каких-либо знаков между ними. Умножение с последующим свертыванием естественно обозначать знаком скалярного произведения. Действительно, если условиться, что знак скалярного произведения означает скалярное умножение соседних с ним векторов, то, например, скалярное произведение вектора $\vec{P} = P_l \cdot \vec{e}_l$ на тензор $\vec{\mathcal{F}}$ равно:

$$\langle \vec{P} \cdot \vec{\mathcal{F}} \rangle = P_l \vec{e}_l d_{ijk} \vec{e}_i \vec{e}_j \vec{e}_k = P_l d_{ijk} \langle \vec{e}_l \cdot \vec{e}_i \rangle \vec{e}_j \vec{e}_k = P_l d_{ijk} \vec{e}_j \vec{e}_k = P_i d_{ijk} \vec{e}_j \vec{e}_k.$$

В результате скалярного умножения полярного вектора на тензор третьего ранга имеем тензор второго ранга с компонентами:

$$P_i d_{ijk} = Q_{jk}.$$

Возможно бискалярное (двойное) произведение тензоров, когда в результате перемножения, например, тензоров второго ранга, получим скаляр:

$$\left(\overset{\wedge}{\omega} : \overset{\wedge}{\sigma} \right) = \omega_{ij} \vec{e}_i \vec{e}_j \sigma_{km} \vec{e}_k \vec{e}_m = \omega_{ij} \sigma_{km} (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_k) (\vec{e}_j \cdot \vec{e}_m) = \omega_{ij} \sigma_{ij}.$$

Заметим, что результат скалярного перемножения двух тензоров рангов R_1 и R_2 является тензором ранга $R = |R_1 - R_2|$.

Аналогично можно ввести операции вычисления векторного произведения двух тензоров разных рангов:

$$\left[\overset{\wedge}{\sigma} \times \bar{P} \right] = \sigma_{ij} \bar{e}_i \bar{e}_j \times P_k \bar{e}_k = \sigma_{ij} P_k \bar{e}_i \left[\bar{e}_j \times \bar{e}_k \right]$$

и двойного векторного произведения:

$$\left[\overset{\wedge}{\omega} \times \overset{\wedge}{\sigma} \right] = \omega_{ij} \bar{e}_i \bar{e}_j \times \sigma_{km} \bar{e}_k \bar{e}_m = \sigma_{ij} \sigma_{km} \left[\bar{e}_i \times \bar{e}_k \right] \left[\bar{e}_j \times \bar{e}_m \right]$$

Дифференциальные операции с тензорами. В физике сплошных сред широко используются дифференциальные операции над тензорами нулевого и первого рангов: вычисление градиента скалярного поля $\varphi \in \mathbb{R}$, обозначаемое как $grad\varphi(\bar{r})$, а также расходимости $div \bar{U}$ и вихря $rot \bar{U}$ векторного поля $\bar{U} \in \mathbb{R}^3$. Аналогичные операции применяются и к объектам более высокой тензорной размерности.

1. Градиент векторного поля $\bar{U} \in \mathbb{R}^3$ - это тензор второго ранга, обозначаемый как $Grad \bar{U}$, с компонентами: $\left(Grad \bar{U} \right)_{ij} = \frac{\partial U_j}{\partial x_i}$.

Транспонированный к нему тензор $\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{r}}$ называется **производной векторного поля** $\bar{U} \in \mathbb{R}^3$ по радиусу-вектору:

$$\left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{r}} \right)_{ij} = \frac{\partial U_i}{\partial x_j}.$$

2. Деформация векторного поля. Симметричная часть каждого из этих тензоров называется **деформацией векторного поля** $\bar{U} \in \mathbb{R}^3$ и обозначается как $Def \bar{U} \in \mathbb{R}^3$:

$$Def \bar{U} = \frac{1}{2} \left(Grad \bar{U} + \frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{r}} \right); \left(Def \bar{U} \right)_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right).$$

3. Расходимость тензорного поля $\mathbb{E} \in \mathbb{R}^3$ - это вектор $Div \mathbb{E}$ с компонентами:

$$\text{Div } \overset{\wedge}{\epsilon}_j = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \quad - \text{ т.е. это сумма по } i.$$

Когда нужно дифференцировать по второму индексу, пользуются расходимостью транспонированного тензора - $\overset{*}{\epsilon}$:

$$\text{Div } \overset{*}{\epsilon}_j = \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial x_k}.$$

Таким образом, если вычисление градиента тензора повышает его ранг на единицу, то вычисление расходимости снижает ранг на такую же величину.

4. Поток тензорного поля. Если тензорное поле $\overset{\wedge}{\epsilon}$ определено во всех точках поверхности S , то поверхностный интеграл: $\int_S \bar{n} \cdot \overset{\wedge}{\epsilon} ds$ называется **поток** тензорного поля через поверхность S . Если же это поле $\overset{\wedge}{\epsilon}$ определено и непрерывно дифференцируемо во всем объеме, ограниченном замкнутой поверхностью S , то справедлива теорема Остроградского-Гаусса:

$$\int_S \bar{n} \cdot \overset{\wedge}{\epsilon} ds = \int_V \text{Div } \overset{\wedge}{\epsilon} dv,$$

т.е. поток тензорного поля через замкнутую поверхность равен суммарной расходимости этого же тензорного поля в объеме, ограниченном этой поверхностью.

5. Вихрь тензорного поля преобразует полярный тензор в псевдотензор, оставляя его ранг неизменным:

$$\text{Rot} \left(\overset{\wedge}{\pi} \right)_{il} = \delta_{ijk} \frac{\partial \pi_{kl}}{\partial x_j},$$

где символ δ_{ijk} – символ Леви-Чивита, который принимает три значения:

$$\delta_{ijk} = \begin{cases} 1 & , ijk = 123, 312, 231 \\ -1 & , ijk = 132, 213, 321 \\ 0 & , ijk = \text{любые другие комбинации} \end{cases}.$$

Псевдотензоры высших рангов. Как отмечалось в предыдущем параграфе, наряду с тензорами в кристаллофизике применяются псевдотензоры. Тензор \hat{A} ранга r - это набор 3^r - чисел, преобразующихся при смене системы координат как произведение r - числа векторов.

$$A_{k_1 k_2 \dots k_r} = C_{k_1 k'_1} C_{k_2 k'_2} \dots C_{k_r k'_r} A_{k'_1 k'_2 \dots k'_r}.$$

Псевдотензор \hat{B} отличается от тензора \hat{A} того же ранга тем, что при переходе к новой системе координат его компоненты $B_{k_1 k_2 \dots k_r}$ наряду с коэффициентами матрицы перехода от одной системы координат к другой умножаются на определитель матрицы перехода:

$$B_{k_1 k_2 \dots k_r} = \det \|C_{i'k}\| C_{k_1 k'_1} C_{k_2 k'_2} \dots C_{k_r k'_r} B_{k'_1 k'_2 \dots k'_r}.$$

В задачах кристаллофизики полярные тензоры связывают два полярных или аксиальных вектора, а псевдотензоры вводятся для описания линейной зависимости полярного тензора от аксиального вектора или наоборот: полярного тензора от псевдоскаляра и т.д.

4.5.2. Внутренняя симметрия тензоров высших рангов.

Соотношения дуальности

В кристаллофизике часто применяются тензоры высших рангов, симметричные по некоторым индексам. Тензор называется **симметричным** по двум или более индексам, если все его изомеры, различающиеся друг от друга перестановкой этих индексов, равны между собой. Так, компоненты тензора третьего ранга, симметричного по двум последним индексам, удовлетворяют условию:

$$d_{ijk} = d_{ikj}, \tag{4.11}$$

а симметричного по всем трем индексам - условию:

$$P_{ijk} = P_{ikj} = P_{jki} = P_{jik} = P_{kji} = P_{kij}.$$

В кристаллофизике встречаются тензоры, симметричные по группам индексов.

Свойство тензора быть симметричным по некоторым индексам или группам индексов называется внутренней симметрией тензора.

Символ \mathbb{V}^r - это символ наличия у тензора внутренней симметрии. Внутреннюю симметрию тензора ранга r по всем индексам обозначают как \mathbb{V}^r . Так, симметричный тензор второго ранга обозначается как \mathbb{V}^2 . Если тензор ранга r симметричен по q индексам, то его внутренняя симметрия обозначается как: $\mathbb{V}^q \mathbb{V}^{r-q}$. Это обозначение не указывает, на каких местах находятся индексы, по которым тензор симметричен - оно относится к любым индексам. Встречаются и более сложные обозначения:

1. $\mathbb{V}^2 \mathbb{V}^2 = \mathbb{V}^2 \mathbb{V}^2$ - символ внутренней симметрии тензора четвертого ранга, симметричного по первой и по второй парам индексов в отдельности.

2. $\mathbb{V}^2 \mathbb{V}^3$ - символ внутренней симметрии тензора шестого ранга, симметричного по первой, второй и третьей паре индексов отдельно.

3. $\mathbb{V}^2 \mathbb{V}^2$ - символ внутренней симметрии тензора четвертого ранга, симметричного относительно перестановки пар индексов: $P_{ijkl} = P_{klij}$.

4. $\mathbb{V}^2 \mathbb{V}^2$ - символ внутренней симметрии тензора четвертого ранга, симметричного по первой и второй паре индексов, а также относительно их перестановки.

Во всех случаях суммарная степень V равна рангу тензора. Эта символика (предложена Яном) позволяет описывать также внутреннюю симметрию псевдотензоров. Приставка «псевдо» обозначается символом « ε » и, следовательно, внутренняя симметрия псевдовектора (т.е. аксиального вектора) обозначается символом εV , симметричного псевдотензора второго

ранга - $\varepsilon[V^2]$ и т.д. Внутреннюю симметрию скаляра обозначают символом "1", а тогда псевдоскаляра - ε .

В кристаллофизике симметричные тензоры высших рангов часто определяют линейные зависимости, в которых участвуют симметричные тензоры второго ранга. Например, тензор внутренней симметрии $V \left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} \right]$ (см. выражение (4.11)) определяет линейную зависимость симметричного тензора второго ранга - $\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} \right]$ от вектора - V :

$$\varepsilon_{kl} = d_{ikl} E_i, \quad \varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}$$

а тензор $\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} \right]$, т.е. подчиняющийся условиям: $P_{ijkl} = P_{jikl} = P_{ijlk} = P_{jilk}$ определяет линейную зависимость одного симметричного тензора второго ранга - $\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} \right]$ от другого такого же тензора.

Симметричные тензоры высших рангов получаются также в результате дифференцирования по тензорным аргументам. Так, дифференцирование скалярной функции по вектору V и симметричному тензору второго ранга $\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} \right]$ приводит к тензору $V \left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} \right]$ (см. выражение (4.11)):

$$d_{ijk} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial p_{jk}} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial p_{kj}} = d_{ikj},$$

а двукратное дифференцирование по несимметричному тензору второго ранга V^2 - к тензору $\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} \right]$:

$$\eta_{klij} = \eta_{ijkl} = \frac{\partial \Phi}{\partial x_{ij} \partial x_{kl}}; \quad \eta_{ij} \neq x_{ji}$$

Число независимых компонент у симметричного тензора меньше, чем у несимметричного. В то время как у тензора с внутренней симметрией V^3 27 независимых компонент, у тензора с внутренней симметрией $[V^3]$ - только 10 (3 компоненты вида η_{kkk} , шесть компонент вида η_{122} и одна компонента

m_{123}) Аналогично, у тензора с симметрией V^4 всего 81 ($=3^4$) независимая компонента, а у тензора с внутренней симметрией $[V^2]^2$ их только 36 ($=6^2$).

Наряду с симметричными тензорами в кристаллофизике применяются и антисимметричные тензоры. **Тензор называется антисимметричным по двум или трем индексам, если его изомеры, отличающиеся друг от друга четной перестановкой этих индексов, равны друг другу, а при нечетной перестановке - противоположны по знаку.** Почему только до трех индексов: в трехмерном пространстве тензоры, антисимметричные более чем по трем индексам, тождественно равны нулю.

Антисимметричность тензоров по Яну обозначается аналогично симметричности, но не квадратными, а фигурными скобками. Например, внутренняя симметрия тензора третьего ранга, антисимметричного по первым двум индексам, обозначается как $\{V^2\}V$ и характеризуется равенством:

$$\beta_{ijk} = -\beta_{jik},$$

а внутренняя симметрия антисимметричного по всем индексам тензора третьего ранга обозначается как $\{V^3\}$ и характеризуется равенствами:

$$e_{ijk} = e_{jki} = e_{kij} = -e_{ikj} = e_{jik} = e_{kji}. \quad (4.12)$$

Этот тензор замечателен тем, что у него всего одна независимая компонента. Действительно, если среди индексов есть хотя бы два одинаковых, то соответствующая компонента тензора равна нулю. А все шесть отличных от нуля компонент имеют в качестве индексов какую-либо перестановку чисел 1, 2 и 3. Следовательно, связаны между собой равенствами (4.12). Если, например, 1, 2 и 3 принять $e_{123} = 1$, то любую компоненту этого тензора можно вычислить с помощью следующего правила:

$$e_{lmn} = \begin{cases} 1, & lmn = 123, 312, 231; \\ -1, & lmn = 132, 213, 321; \\ 0, & \text{все другие группы (111, 112...)} \end{cases}.$$

Учитывая важность данного тензора для дальнейшего изложения, запишем его в развернутом виде. В отличие от тензора второго ранга, являющегося плоскостной матрицей, тензор третьего ранга является объемной матрицей и может рассматриваться как кубик Рубика, состоящий из трех слоев. Будем считать, что у компоненты тензора e_{ijk} первый индекс « i » обозначает слой, в котором эта компонента находится, второй индекс « j » – строку, в которой эта компонента находится, а третий « k » – столбец в слое. Тогда получим:

Первый слой:	Второй слой:	Третий слой:
$\ e_{1jk}\ = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix},$	$\ e_{2jk}\ = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix},$	$\ e_{3jk}\ = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix},$

При смене системы координат, описываемой матрицей косинусов $\|C_{ik}'\|$, компоненты антисимметричного тензора третьего ранга преобразуются по следующему закону (приводится без вывода):

$$e_{l'm'n'} = \begin{cases} \det\|C_{ik}'\|, & l'm'n' = 123, 312, 231; \\ -\det\|C_{ik}'\|, & l'm'n' = 132, 213, 321; \\ 0, & \text{все другие группы.} \end{cases}$$

Видим, что закон преобразования компонент этого тензора (а фактически его единственной компоненты e_{123}) такой же, как и у псевдотензора, а учитывая единственность независимой компоненты – как у псевдоскаляра.

Таким образом, антисимметричный тензор третьего ранга имеет всего одну независимую компоненту, которая, к тому же, является псевдоскаляром.

Поэтому можно задать этот тензор, если известен всего один псевдоскаляр. С помощью псевдотензора Леви-Чивита δ_{ijk} можно установить связь между антисимметричным тензором третьего ранга e_{ijk} и псевдоскаляром ϕ , который равен «+1» в правой системе координат и «-1» в левой системе:

$$e_{ijk} = \phi \delta_{ijk}, \quad \phi = \frac{1}{6} \delta_{ijk} e_{ijk}, \quad (4.13)$$

где вычисляется сумма по всем шести отличным от нуля компонентам.

Продолжая замеченную связь между тензорами и псевдотензорами разных рангов, вспомним, что любой тензор второго ранга можно разложить на симметричную и антисимметричную части:

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A'_{11} & A'_{12} & A'_{13} \\ A'_{21} & A'_{22} & A'_{23} \\ A'_{31} & A'_{32} & A'_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & A''_{12} & A''_{13} \\ -A''_{12} & 0 & A''_{23} \\ -A''_{13} & -A''_{23} & 0 \end{vmatrix}, \quad (4.14)$$

где антисимметричная часть (последнее слагаемое в выражении (4.14)) является антисимметричным тензором второго ранга. Глядя на его структуру, нетрудно видеть, что он имеет всего три независимые компоненты: A''_{12} , A''_{13} , A''_{23} . Но известно, что три независимые величины задают вектор, а в данном случае, учитывая знакопеременный характер компонент – аксиальный вектор.

Значит, можно антисимметричный тензор второго ранга задать, если указать три величины и указать возможность смены их знаков на обратный, т.е. если указать аксиальный вектор. Это обратимое соответствие между аксиальным вектором $\overset{\circ}{a}$ и антисимметричным тензором второго ранга

$\hat{A} = -\hat{A}^*$ устанавливается с помощью символа Леви-Чивита:

$$A_{mn} = -\delta_{lmn} a_l, \quad a_l = -\frac{1}{2} \delta_{lmn} A_{mn}. \quad (4.15)$$

В сущности аксиальный вектор $\overset{\circ}{a}$ и антисимметричный тензор второго ранга - это две формы математической записи одного и того же геометрического объекта. Аналогичное утверждение справедливо и относительно псевдоскаляра и антисимметричного тензора третьего ранга.

Соотношения (4.13), (4.15) и им подобные называются **соотношениями дуальности** (от английского слова «*dual*» - двойственный): антисимметричный тензор второго ранга дуален аксиальному вектору, антисимметричный тензор третьего ранга дуален псевдоскаляру, а антисимметричный псевдотензор третьего ранга дуален скаляру.

Соотношения дуальности лаконичны и выразительно записываются в символике Яна: соотношение (4.13) – в форме

$$\mathcal{V}^3 \leftrightarrow \varepsilon, \quad (4.16)$$

а соотношение (4.15) – в форме

$$\mathcal{V}^2 \leftrightarrow \varepsilon V. \quad (4.17)$$

Главное преимущество такой формы записи – возможность чисто формального вывода новых соотношений дуальности из известных. Так, умножив обе части выражения (4.16) на ε и заметив, что $\varepsilon^2=1$ (произведение двух псевдоскаляров равно скаляру), получим:

$$\varepsilon \mathcal{V}^3 \overset{!}{\underset{!}{\rightleftharpoons}} 1$$

- соотношение дуальности между антисимметричным псевдотензором третьего ранга и скаляром. Умножив на V обе части выражения (4.17), получим:

$$V \mathcal{V}^2 \overset{!}{\underset{!}{\rightleftharpoons}} \varepsilon V^2$$

- антисимметричный по двум индексам тензор третьего ранга дуален псевдотензору второго ранга. Умножив же обе части соотношения (4.17) на ε ,

найдем:

$$\varepsilon \overset{\{2\}}{\leftrightarrow} V$$

- антисимметричный тензор второго ранга дуален полярному вектору.

Таким образом, в зависимости от рангов тензоров, используемых в описании рассматриваемой задачи, можно использовать соотношения дуальности с тем, чтобы выбрать наиболее удобный ранг вводимого в задачу тензора. Соотношения дуальности широко используются в кристаллооптике и при описании физики магнитных явлений в твердых телах.

4.5.3. Внешняя симметрия тензоров высших рангов

Предположим, что исследуется какое-либо его физическое свойство в кристалле, описываемое тензором ранга r . Набор компонент материального тензора относительно этой системы координат численно характеризует рассматриваемое физическое свойство кристалла. С кристаллом связана кристаллофизическая система координат. Подвергнем эту систему координат некоторому ортогональному преобразованию. Новые компоненты тензора, вообще говоря, будут иметь значения, отличающиеся от значений компонент тензора в исходной системе координат. Однако если данное преобразование входит в группу точечной симметрии кристалла, то они останутся неизменными. Следовательно, материальный тензор инвариантен относительно всех преобразований точечной симметрии данного кристалла. Значит, материальный тензор кристалла, обладающего определенной симметрией, не может быть произвольным, а должен удовлетворять требованиям, вытекающим из симметрии кристалла.

Сформулируем эти требования в математической форме. Пусть \mathbb{A} - материальный тензор ранга r , а $\|C_{j'k}\|$ - матрица какого-либо преобразования

симметрии кристалла. В новой системе координат компоненты тензора, вообще говоря, равны следующим величинам

$$A_{i_1 i_2 \dots i_r} = C_{i_1 i_1} C_{i_2 i_2} \dots C_{i_r i_r} A_{i_1 i_2 \dots i_r} \quad (4.18)$$

Так как данное преобразование принадлежит точечной группе симметрии кристалла, то компоненты тензора не изменяются, что можно представить следующим образом:

$$A_{i_1 i_2 \dots i_r} = \delta_{i_1 i_1} \delta_{i_2 i_2} \dots \delta_{i_r i_r} A_{i_1 i_2 \dots i_r} \quad (4.19)$$

Сравнивая (3.18) и (3.19), получим:

$$(C_{i_1 i_1} C_{i_2 i_2} \dots C_{i_r i_r} - \delta_{i_1 i_1} \delta_{i_2 i_2} \dots \delta_{i_r i_r}) A_{i_1 i_2 \dots i_r} = 0; \quad (4.20)$$

Эти 3^r - равенств должны иметь место для всех матриц симметрических преобразований кристалла, а если таковых *N*, то уравнений будет *N*·3^r. Но не все эти уравнения линейно независимы: из *N* преобразований надо оставить только соответствующие генераторам точечной группы кристалла. Тогда их количество уменьшится. Тем не менее, равенств (4.20), связывающих компоненты тензора и наборы элементов точечной симметрии, больше того, чем это допустимо для решения математических задач в общем виде.

Для материального псевдотензора уравнения (4.20) должны содержать Δ - определитель матрицы $\|C_{i'k}\|$:

$$(\Delta \cdot C_{i_1 i_1} C_{i_2 i_2} \dots C_{i_r i_r} - \delta_{i_1 i_1} \delta_{i_2 i_2} \dots \delta_{i_r i_r}) B_{i_1 i_2 \dots i_r} = 0. \quad (4.21)$$

В общем случае уравнения (4.20) и (4.21) решить не удастся. Поэтому прибегают к другим методам выяснения влияния того или элемента симметрии. Рассмотрим влияние на материальные тензоры центра симметрии в кристалле. В этом случае материальные тензоры должны быть инвариантны относительно инверсии. Соответствующая матрица косинусов $C_{i'k} = -\delta_{i'k}$, а $\Delta = \det \|C_{i'k}\| = -1$. Поэтому из (4.20) получим:

$$\left[\left(\prod_{i=1}^r -1 \right) - 1 \right] \cdot \delta_{i_1 i_1} \delta_{i_2 i_2} \dots \delta_{i_r i_r} A_{i_1 i_2 \dots i_r} = 0; \quad (4.22)$$

т.е. если ранг тензора четный, то $0 \cdot A_{i_1 i_2 \dots i_r} = 0$ и это означает, что условия на тензор \mathbb{K} отсутствуют (тензор \mathbb{K} в (4.22) любой), т.е. все тензоры четного ранга инвариантны относительно инверсии. Это означает, что **в кристаллах с центром симметрии существуют и наблюдаемы любые физические свойства, описываемые тензорами четного ранга.**

При нечетном значении ранга r из (4.22) находим:

$$-2A_{i_1 i_2 \dots i_r} = 0 \quad \text{или} \quad A_{i_1 i_2 \dots i_r} = 0,$$

т.е. все материальные тензоры нечетного ранга обращаются в нуль: **в кристаллах с центром симметрии отсутствуют какие-либо физические свойства, описываемые тензорами нечетного ранга.**

Если рассматривать псевдотензор, то из-за наличия $\Delta = -1$ в выражении (4.21) необходимо (4.22) переписать в виде:

$$\left[(-1)^{r+1} - 1 \right] \cdot \delta_{i_1 i_1} \delta_{i_2 i_2} \dots \delta_{i_r i_r} A_{i_1 i_2 \dots i_r} = 0;$$

Поэтому материальные псевдотензоры нечетного ранга centrosymmetric, а четного ранга - равны нулю.

В связи с этими результатами вводят новую классификацию тензоров. Истинные тензоры четного ранга и псевдотензоры нечетного ранга называются **тензорами четного типа**, а истинные тензоры нечетного ранга и псевдотензоры четного ранга называются **тензорами нечетного типа**. Можно показать, что одно и то же физическое свойство можно рассматривать как истинный тензор или псевдотензор (аксиальный тензор). Поэтому, говоря, что какая-то величина является тензором, мы характеризуем не само физическое свойство, а лишь способ его представления, математической записи. Напротив, четность или нечетность - действительное физическое свойство кристалла.

Материальный тензор кристалла инвариантен относительно всех преобразований точечной симметрии кристалла, но не только их. Например,

материальный тензор четного типа инвариантен относительно инверсии даже тогда, когда кристалл, свойство которого он описывает, не имеет центра симметрии. Поэтому для характеристики всех инвариантных преобразований тензора вводится понятие группы его внешней симметрии. **Группа внешней симметрии тензора - это совокупность всех ортогональных преобразований, относительно которых данный тензор инвариантен.**

Наиболее очевидный метод определения внешней симметрии тензора таков: набор основных формул теории внешней симметрии тензоров (равенства (4.20)) рассматривают как систему уравнений относительно матричных элементов $C_{i'k}$, а тензор \mathfrak{A} считают заданным. Каждое решение этой системы - матрица преобразований, относительно которых тензор \mathfrak{A} инвариантен. Среди матриц, удовлетворяющих уравнениям (4.20), могут оказаться и матрицы, описывающие неортогональные преобразования системы координат. Согласно определению внешней симметрии их надо отбросить, а оставшиеся составят группу внешней симметрии тензора \mathfrak{A} .

В принципе этот метод позволяет определить группу внешней симметрии тензора, однако применять его на практике невозможно: уравнения (4.20) линейны относительно $A_{i_1 i_2 \dots i_r}$, а относительно матричных элементов - это уравнения r -той степени и, следовательно, решить эту систему удастся не всегда. Поэтому для определения группы внешней симметрии используют другие методы, некоторые из которых рассматриваются далее.

4.5.4. Метод прямой проверки в декартовых координатах

В данном параграфе показан удобный метод получения условий, которым должен удовлетворять тензор, инвариантный относительно

отражения в плоскости симметрии, относительно поворота вокруг осей второго и четвертого порядка, а также третьего порядка, имеющих в кристаллах кубической системы. Для всех этих преобразований характерно, что их матрицы содержат только целые числа. Нас интересует вид материального тензора в кристаллографической системе координат, построенной на элементах симметрии кристалла. При этом будем помнить, что компоненты тензора ранга r преобразуются как произведение r компонент матрицы симметрического преобразования системы координат или как произведение r векторов.

Тензор первого ранга. Для начала рассмотрим преобразование компонент полярного вектора при повороте системы координат вокруг оси X_3 на 90^0 градусов. Пусть в исходной системе координат с ортами $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3$ он имеет координаты x, y, z . Орты и координаты в новой системе обозначим теми же символами, дополнив их штрихами. Если при этом преобразовании вектор не изменился, то справедливо равенство:

$$x \cdot \bar{e}_1 + y \cdot \bar{e}_2 + z \cdot \bar{e}_3 = x' \cdot \bar{e}_1' + y' \cdot \bar{e}_2' + z' \cdot \bar{e}_3'. \quad (4.23)$$

Легко видеть, что матрица косинусов такого преобразования имеет вид:

$$\|C_{j'k}\| = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Тогда новые орты, определяемые по формуле: $\bar{e}_{j'} = C_{j'k} \cdot \bar{e}_k$, будут равны:

$$\bar{e}_1 = \bar{e}_1'; \quad \bar{e}_2 = \bar{e}_2'; \quad \bar{e}_3 = \bar{e}_3'$$

и, следовательно, равенство (4.18) примет вид:

$$x \cdot \bar{e}_1 + y \cdot \bar{e}_2 + z \cdot \bar{e}_3 = x' \cdot \bar{e}_1' - y' \cdot \bar{e}_2' + z' \cdot \bar{e}_3'.$$

Так как орты независимы, то это векторное равенство справедливо, когда коэффициенты при соответствующих ортах равны друг другу:

$$x' = y; \quad y' = y - x; \quad z' = z. \quad (4.24)$$

Метод прямой проверки применим только к ортогональным преобразованиям с целочисленными матрицами косинусов. Матрица целочисленна только для некоторых углов поворотов, оси которых расположены определенным образом относительно системы координат.

Тензор второго ранга. Рассмотрим преобразование компонент тензора второго ранга. Если компоненты вектора при повороте вокруг 4_z подвергаются преобразованию

$$x' = y; \quad y' = y - x; \quad z' = z,$$

то компоненты тензора второго ранга преобразуются как произведения двух компонент вектора:

$$\begin{aligned} T_{1'1'} &= C_{1k}C_{1m}T_{km} = C_{12}C_{12}T_{22} = T_{22}; \\ T_{1'2'} &= C_{1k}C_{2m}T_{km} = C_{12}C_{21}T_{21} = -T_{21}; \\ T_{1'3'} &= C_{1k}C_{3m}T_{km} = C_{12}C_{33}T_{23} = T_{23}; \\ T_{2'1'} &= C_{2k}C_{1m}T_{km} = C_{21}C_{12}T_{12} = -T_{12}; \\ T_{2'2'} &= C_{2k}C_{2m}T_{km} = C_{21}C_{21}T_{11} = T_{11}; \\ T_{2'3'} &= C_{2k}C_{3m}T_{km} = C_{21}C_{33}T_{13} = -T_{13}; \\ T_{3'1'} &= C_{3k}C_{1m}T_{km} = C_{33}C_{12}T_{32} = T_{32}; \\ T_{3'2'} &= C_{3k}C_{2m}T_{km} = C_{33}C_{21}T_{31} = -T_{31}; \\ T_{3'3'} &= C_{3k}C_{3m}T_{km} = C_{33}C_{33}T_{33} = T_{33}. \end{aligned}$$

Эти соотношения между компонентами можно переписать в сокращенной форме, если использовать следующие обозначения: приравнивать только индексы равных компонент тензора, заключив их в квадратные скобки:

$$\begin{aligned} [1'1'] &= 11' = 22; \quad 12' = -21; \quad 13' = 23; \\ 21' &= -12; \quad 22' = 11; \quad 23' = -13; \\ 31' &= 32; \quad 32' = -31; \quad 33' = 33. \end{aligned}$$

В координатной записи эти равенства будут выглядеть так:

$$\begin{aligned}
xx' &= yy' ; & xy' &= -yx' ; & xz' &= yz' ; \\
yx' &= -xy' ; & yy' &= xx' ; & yz' &= -xz' ; \\
zx' &= zy' ; & zy' &= -zx' ; & zz' &= zz' .
\end{aligned}$$

Заметим, что этот результат можно получить, перемножая между собой соответствующие равенства из (4.24).

Проделав аналогичные операции для преобразований 2_x , 2_z , 3_{xyz} (в последнем случае ось вращения направлена по пространственной диагонали куба), составим таблицу соответствий (см. таблицу соответствий). Пользуясь ею, в качестве примера найдём вид тензора второго ранга в кристаллах различной симметрии.

Точечная группа 2 . В данном кристаллографическом классе моноклинной сингонии ось симметрии второго порядка 2 параллельна оси X_3 . Поэтому компоненты материального тензора под действием операции 2_z не должны меняться. Следовательно, мы вправе поставить знак равенства между индексами, стоящими в одних и тех же строках в первом и втором столбцах рассматриваемой таблицы. Но равенство типа $[yz]' = -[yz]$ выполняется только при $[yz]=0$. Тривиальные же равенства вида $[xx]' = [xx]$ выполняются при любых значениях компонент. Таким образом, материальный тензор второго ранга для кристаллов точечной симметрии 2 (ось симметрии порядка $2 \parallel X_3$) будет:

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{21} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}. \quad (4.25)$$

Таблица 5. Соответствие индексов компонентам тензора

g	2_z	2_x	4_z	3_{xyz}
$[x']$	$[x]$	$[x]$	$[y]$	$[y]$
$[y']$	$[y]$	$[y]$	$[x]$	$[x]$

$[z^{\perp}]$	$[z^-]$	$[z^-]$	$[z^-]$	$[x^-]$
$[yz^{\perp}]$	$-[yz^-]$	$[yz^-]$	$-[xz^-]$	$[x^-]$
$[y^{\perp}]$	$-[y^-]$	$[y^-]$	$-[x^-]$	$[z^-]$
$[x^{\perp}]$	$-[x^-]$	$-[x^-]$	$[y^-]$	$[y^-]$
$[z^{\perp}]$	$-[z^-]$	$-[z^-]$	$[yz^-]$	$[yx^-]$
$[y^{\perp}]$	$[y^-]$	$-[y^-]$	$-[xz^-]$	$[yz^-]$
$[x^{\perp}]$	$[yx^-]$	$-[x^-]$	$-[y^-]$	$[y^-]$

В действительности в моноклинной сингонии ось симметрии второго порядка расположена по оси Y . Поэтому для этой ориентации тензор (4.25) переписется в виде:

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & 0 & T_{13} \\ 0 & T_{22} & 0 \\ T_{31} & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Рассматриваемый тензор - четного типа и поэтому он должен иметь такой же вид и для других кристаллов, входящих в ту же сингонию: $m, 2/m$.

Точечная группа 4. Поскольку среди операций группы 4 есть ось симметрии 2_z , можно воспользоваться результатами предыдущего случая и сразу положить равными нулю компоненты $[yz]$, $[zy]$, $[zx]$ и $[xz]$. Для остальных компонент, согласно приведённой выше таблице, имеем: $[xx]'=[yy]$, $[xy]'=-[yx]$ и поэтому для данной группы вид тензора второго ранга будет следующий:

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ -T_{12} & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Мы рассмотрели группы с одним генератором. Если же их несколько, то условие равенства преобразованных и непреобразованных компонент должно выполняться для каждого генератора в отдельности. Воспользуемся этим

правилом, чтобы определить вид материального тензора второго ранга для точечных групп 222, 422, 23, 432.

Точечная группа 222. После проверки на инвариантность (здесь два генератора: $2_z, 2_x$) относительно 2_z остаются компоненты как в (3.25). После проверки на инвариантность относительно 2_x компоненты T_{12} и T_{21} обращаются в ноль:

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Точечная группа 422. (генераторы $4_z, 2_x$) после проверки на инвариантность относительно 4_z остаются компоненты $[xx]=[yy], [zz], [xy] = -[yx]$. Проверки по 2_x отсеивает два последних равенства и тогда:

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Точечная группа 23 имеет генераторы $2_z, 3_{xyz}$. Рассматривая элементы, оставшиеся после проверки на 2_z , получаем равенства $[xx]=[zz]=[yy], [xy]=[zx]=0, [xz]=[yx]=0$. Тогда:

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} \end{vmatrix}.$$

Рассмотренный пример показывает, во-первых, что группа внешней симметрии тензора может оказаться значительно шире группы симметрии кристалла; во-вторых, существует связь между внешней и внутренней симметриями тензора. Действительно, мы рассматривали тензор внутренней симметрии V^2 . Условия же инвариантности привели к тому, что наш тензор стал $[V^2]$. Так внешняя симметрия предопределила внутреннюю симметрию.

К тензорам высших рангов метод прямой проверки применяется также, хотя приходится рассматривать больше компонент. Так, практически без

вычислений определяется вид материального тензора любого ранга для моноклинной, ромбической, тетрагональной и кубической систем. Остаются не рассмотренными триклинная и гексогональная системы, поскольку в них имеются повороты с нецелочисленными матрицами преобразования системы координат.

4.6.5. Метод прямой проверки в циклических координатах. Теорема Германа

Рассмотренный метод прямой проверки неприменим для тензоров, инвариантных относительно осей симметрии третьего, шестого и бесконечного порядка. Для решения задач о нахождении вида тензоров инвариантных относительно этих преобразований симметрий требуются более сложные методы. Один из них - метод прямой проверки в циклических координатах.

Введем в рассмотрение циклические базисные вектора:

$$\bar{j} = \frac{1}{2} (\bar{e}_1 + i\bar{e}_2); \quad \bar{j}^* = \frac{1}{2} (\bar{e}_1 - i\bar{e}_2); \quad \bar{e} = \bar{e}_3; \quad (4.26)$$

Эти вектора не лежат в одной плоскости, так как:

$$(\bar{j} \times \bar{j}^*) \cdot \bar{e} = -\frac{1}{2}i \neq 0$$

и поэтому их можно рассматривать как базис новой системы координат. Обращение формул (4.26) дает:

$$\bar{e}_1 = i\bar{j}^* - \bar{j}; \quad \bar{e}_2 = i\bar{j} + \bar{j}^*; \quad \bar{e} = \bar{e}_3;$$

Теперь запишем один и тот же вещественный вектор $\bar{V}(x, y, z)$ в декартовом и циклическом базисе:

$$x \cdot \bar{e}_1 + y \cdot \bar{e}_2 + z \cdot \bar{e}_3 = \xi \cdot \bar{j} + \eta \cdot \bar{j}^* + z \cdot \bar{e}$$

Заменяя здесь \bar{e}_1 и \bar{e}_2 их выражениями через \bar{j} , \bar{j}^* и, приравняв их коэффициенты при одинаковых векторах, получим:

$$\xi = x - iy; \quad \eta = x + iy; \quad z = z; \quad \eta = \xi^*; \quad (4.27)$$

Повернем теперь систему координат вокруг оси X_3 на угол φ (рис. 22). Тогда новые базисные вектора в декартовой системе координат будут равны:

$$\bar{e}'_1 = \bar{e}_1 \cdot \cos \varphi + \bar{e}_2 \cdot \sin \varphi;$$

$$\bar{e}'_2 = -\bar{e}_1 \cdot \sin \varphi + \bar{e}_2 \cdot \cos \varphi;$$

$$\bar{e}'_3 = \bar{e}_3.$$

Им соответствует и новый циклический базис:

$$\bar{j}' = \frac{1}{2} (\bar{e}'_1 + i\bar{e}'_2); \quad \bar{j}^* = \frac{1}{2} (\bar{e}'_1 - i\bar{e}'_2); \quad \bar{e}' = \bar{e};$$

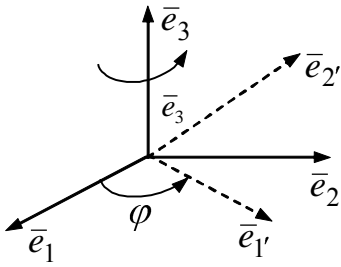


Рис.22

Чтобы получить закон преобразования циклических координат при повороте, выразим новые декартовы орты через циклические базисные вектора

$$\begin{aligned} \bar{j}' &= \frac{1}{2} (\bar{e}_1 \cdot \cos \varphi + \bar{e}_2 \cdot \sin \varphi - i \bar{e}_1 \cdot \sin \varphi + i\bar{e}_2 \cdot \cos \varphi) = \\ &= \frac{1}{2} [\bar{e}_1 \cos \varphi - i \sin \varphi + i\bar{e}_2 \cos \varphi - i \sin \varphi] = \\ &= \cos \varphi - i \sin \varphi \cdot \frac{1}{2} (\bar{e}_1 + i\bar{e}_2) = e^{-i\varphi} \cdot \bar{j}; \end{aligned}$$

Далее:
$$\bar{j}^* = e^{i\varphi} \cdot \bar{j}^*; \quad \bar{e}' = \bar{e}.$$

Найдем закон преобразования компонент:

$$\xi \cdot \bar{j} + \xi^* \cdot \bar{j}^* + z \cdot \bar{e} = \xi' \cdot \bar{j}' + \xi'^* \cdot \bar{j}'^* + z' \cdot \bar{e}'.$$

Но вектор \bar{V} в новой и старой системах циклических координат один и тот же, т.к. поворот вокруг оси z входит в точечную группу симметрии рассматриваемого кристалла. Поэтому

$$\xi \cdot \bar{j} + \xi^* \cdot \bar{j}^* + z \cdot \bar{e} = \xi' \cdot e^{-i\varphi} \cdot \bar{j}' + \xi'^* \cdot e^{i\varphi} \bar{j}'^* + z' \cdot \bar{e}$$

или же: $\xi' = e^{i\varphi} \xi; \quad \xi'^* = e^{-i\varphi} \xi^*; \quad z' = z$

Если компоненте ξ приписать индекс “1”, компоненте η - индекс “-1”, а компоненте z - индекс “0”, то закон преобразования циклических координат при повороте вокруг оси X_3 можно записать с помощью матрицы $\|C_{i'k}\|$:

$$C_{k'l} = e^{ik'\varphi} \delta_{k'l} = e^{il\varphi} \delta_{k'l}.$$

Тогда закон преобразования циклических компонент тензора \mathfrak{K} ранга r при повороте на угол φ вокруг оси X_3 принимает вид:

$$A_{k_1 k_2 \dots k_r} = \exp \left[i(\varphi + l_2 + \dots + l_r) \right] \delta_{k_1 l_1} \delta_{k_2 l_2} \dots \delta_{k_r l_r} \cdot A_{l_1 l_2 \dots l_r}.$$

Если поворот оси X_3 представляет собой единичный поворот вокруг оси симметрии n -того порядка, то $\varphi = 2\pi/n$ и

$$C_{k'l} = \exp \left[\frac{2\pi i}{n} l \right] \delta_{k'l}. \quad (4.28)$$

Пусть тензор \mathfrak{K} ранга r задан своими компонентами $A_{l_1 l_2 \dots l_r}$ относительно циклической системы координат. Сформулируем условия, которым должны удовлетворять эти компоненты, чтобы тензор \mathfrak{K} был инвариантен относительно группы поворотов вокруг оси симметрии n -того порядка. Матрица $\|C_{i'k}\|$ в виде (4.28) подставляется в основное уравнение инвариантности тензора:

$$(C_{i_1 k_1} C_{i_2 k_2} \dots C_{i_r k_r} - \delta_{i_1 k_1} \delta_{i_2 k_2} \dots \delta_{i_r k_r}) \cdot A_{k_1 k_2 \dots k_r} = 0.$$

Тогда имеем:

$$\left\{ \exp \left[\frac{2\pi i}{n} (l_1 + l_2 + \dots + l_r) \right] - 1 \right\} A_{l_1 l_2 \dots l_r} = 0. \quad (4.29)$$

Согласно выражению (4.29) отличными от нуля будут те компоненты тензора \mathfrak{K} , для которых $\{ \dots \} = 0$. Но $\exp(2\pi i S) = 1$ тогда, когда S -целое число или ноль. Таким образом, при наличии в кристалле оси симметрии произвольного порядка отличны от нуля только те компоненты тензора, сумма индексов у которых равна нулю или делится на n без остатка.

В итоге получили простое правило, согласно которому без каких-либо вычислений можно записать отличные от нуля компоненты тензора, инвариантного относительно группы поворотов в циклической системе координат. Укажем в качестве примера отличные от нуля циклические компоненты тензора \mathbb{A} четвертого ранга, инвариантного относительно поворота вокруг оси симметрии 3-его порядка: сумма их индексов должна быть равна нулю или ± 1 . Компонент, получающихся из выписанных при любой перестановке индексов, будет достаточно много, поэтому запишем часть из них:

$$A_{-1-1-10} = A_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}0}; A_{\bar{1}\bar{1}11}; A_{\bar{1}001}; A_{0000}; A_{0111}, \dots$$

Здесь знак минус перед 1 ставим "̄" сверху: $-1 = \bar{1}$. Другие отличные от нуля компоненты получаются из приведенных перестановкой индексов.

Применим эти результаты для инверсионных поворотов. При инверсии циклические координаты ведут себя также, как и декартовые: меняют знак на обратный. Поэтому матрица преобразования циклических координат при инверсионном повороте отличается от полученной ранее матрицы для простого поворота только знаком:

$$C_{K'l} = -e^{il\varphi} \delta_{K'l}.$$

Условия инвариантности тензора относительно инверсионной оси порядка n имеют вид:

$$\left\{ \epsilon^{1\bar{r}} \cdot \exp \left[\frac{2\pi i}{n} (\epsilon_1 + l_2 + \dots + l_r) \right] - 1 \right\} A_{l_1 l_2 \dots l_r} = 0, \quad (4.30)$$

где r - ранг тензора \mathbb{A} . Для тензоров четного ранга оно, таким образом, не отличается от условия инвариантности относительно простой оси поворотов того же порядка. У тензоров же нечетного ранга, инвариантных относительно поворотов, отличны от нуля лишь компоненты, для которых частное от деления суммы индексов на порядок оси есть полуцелое число:

$$\frac{1}{n} (l_1 + l_2 + \dots + l_r) \supseteq \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$$

Действительно, квадратная скобка в уравнении (4.30) при нечетном r при этом условии обращается в ноль.

Нетрудно записать эти условия инвариантности для псевдотензоров.

Если у тензора отличны от нуля только такие циклические компоненты, сумма индексов которых равна нулю, то тензор, очевидно, будет инвариантен относительно любых поворотов, так как условие инвариантности (4.30) для него выполняется при любых n . Но это означает, что данный тензор инвариантен относительно группы ∞ и ясно, что только такие тензоры и обладают этим свойством. Этот результат не только дает возможность найти общий вид материальных тензоров для текстур, но также позволяет доказать одну из важнейших теорем кристаллофизики.

Теорема Германа. Если тензор ранга r имеет ось симметрии порядка n и $r < n$, то для данного физического свойства ось симметрии n – того порядка выступает как ось симметрии бесконечного порядка.

Доказательство этой теоремы довольно простое. Так как циклические индексы принимают значение $\pm 1, 0$, то сумма индексов для любой компоненты по абсолютной величине не превышает ранга матрицы r . Если $r < n$, то для выполнения условия инвариантности (4.30) необходимо, чтобы эта сумма индексов для отличных от нуля компонент равнялась нулю. Но если числитель дроби в (4.29) равен нулю, то это условие обеспечит равенство нулю всех компонент тензора с указанной суммой индексов вне зависимости от величины порядка оси симметрии. Поэтому порядок оси симметрии n может быть любым, а это означает, что имеем дело с осью симметрии бесконечного порядка – только она содержит все возможные оси симметрии любого порядка. Значит, взамен оси n – того порядка тензор имеет ось симметрии бесконечного порядка или, другими словами: для

физического свойства ранга $r < n$ ось порядка n выступает как ось симметрии бесконечного порядка. Теорема доказана.

Теорема Германа находит многочисленные применения. Пользуясь ей, можно предсказывать изотропность и анизотропию физических свойств исходя только из сравнения ранга физического свойства и порядка осей симметрии, имеющихся в элементарной ячейке. Покажем это на примерах.

Материальные тензоры второго ранга для кристаллов средней категории имеют согласно этой теореме ось порядка ∞ , проходящую по главной оси симметрии кристалла. Значит, в перпендикулярной ей плоскости физические свойства второго ранга будут изотропными. Далее, согласно этой теореме, все физические свойства второго ранга для кубических кристаллов изотропны, так как эти кристаллы имеют оси симметрии третьего и четвертого порядка, а ранг рассматриваемых тензоров равен двум.

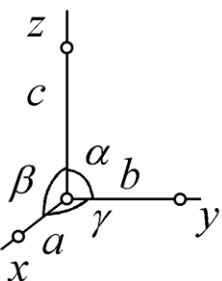
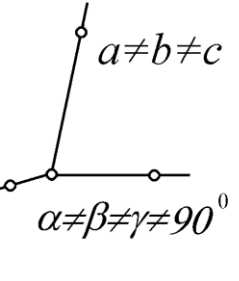
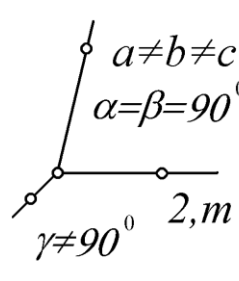
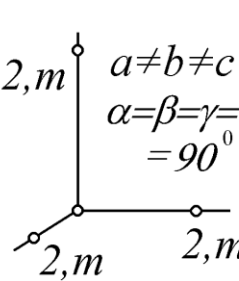
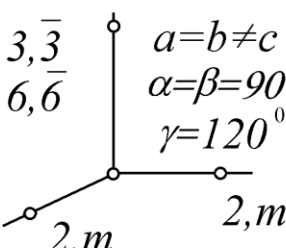
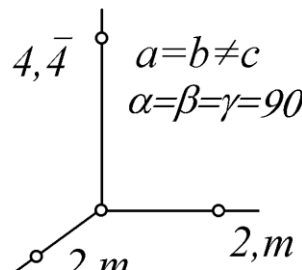
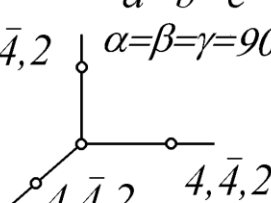
5. ЛИТЕРАТУРА

1. В.В. Пасынков, В.С. Сорокин. Материалы электронной техники. Санкт-Петербург, «Лань», 2001. – 366 с.
2. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979.
3. Дж. Най. Физические свойства кристаллов и их описание с помощью тензоров и матриц. М.: Мир, 1967.
4. Н.В. Переломова, М.М. Тагиева. Задачник по кристаллофизике. М.: Наука, 1972.
5. Б.А. Струков. Сегнетоэлектричество. М.: Наука, 1979.
6. И.С. Желудев. Электрические кристаллы. М.: Наука, 1969.
7. И.С. Желудев. Симметрия и её приложения. М.: Атомиздат, 1976.

ПРИЛОЖЕНИЯ

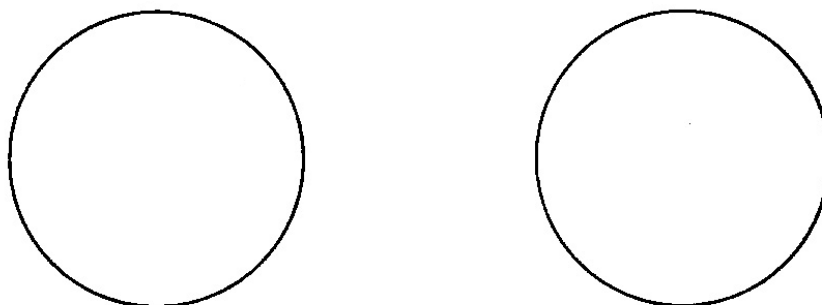
Таблица 1

Стандартные установки кристаллографической системы координат в кристаллах различных систем

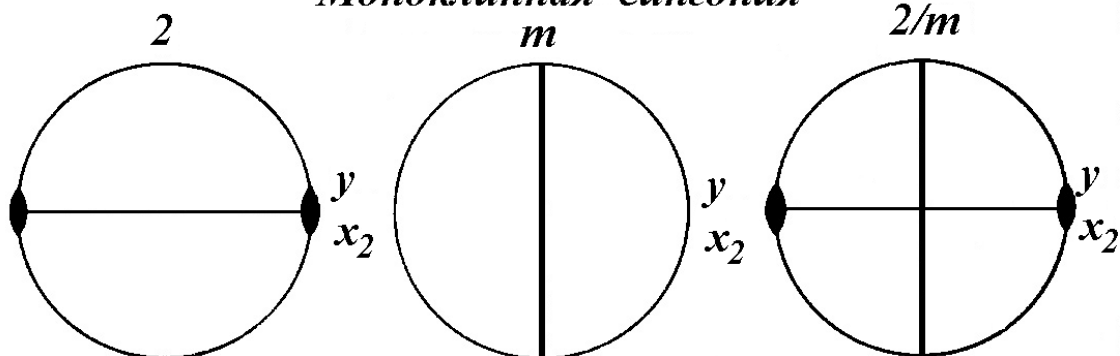
<p>Обозначения:</p> 	<p>Триклинная</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$</p>	<p>Моноклинная</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$</p>	<p>Ромбическая</p>  <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>
<p>Тригональная и гексагональная</p>  <p>$3, \bar{3}$ $6, \bar{6}$</p> <p>$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$</p>	<p>Тетрагональная</p>  <p>$4, \bar{4}$</p> <p>$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>	<p>Кубическая</p>  <p>$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$</p>	

Стереографические проекции кристаллов
различной точечной симметрии

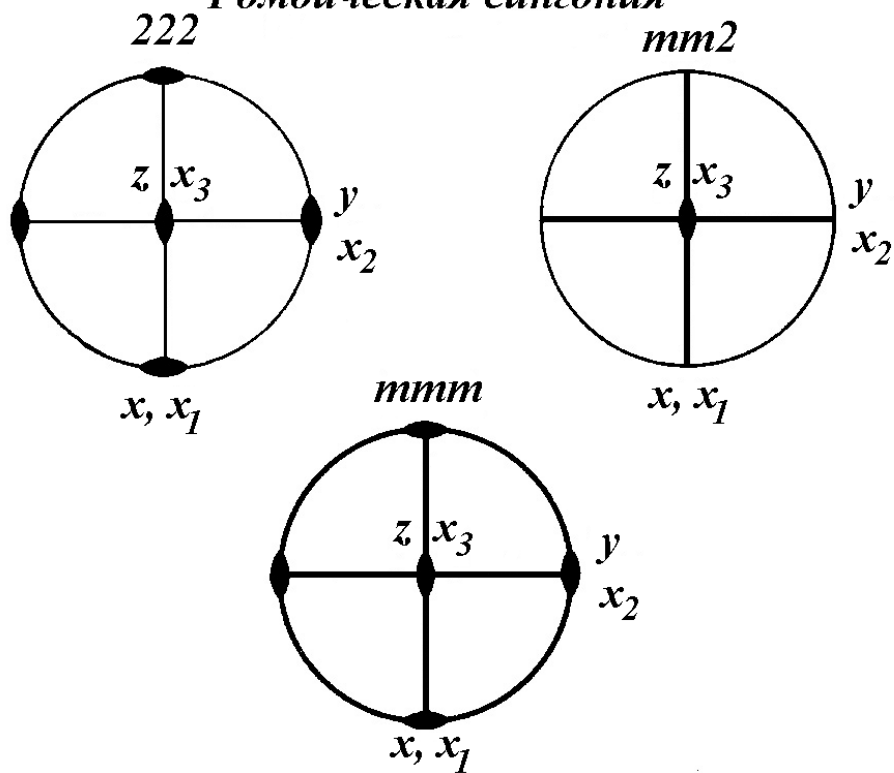
1 Триклинная сингония $\bar{1}$



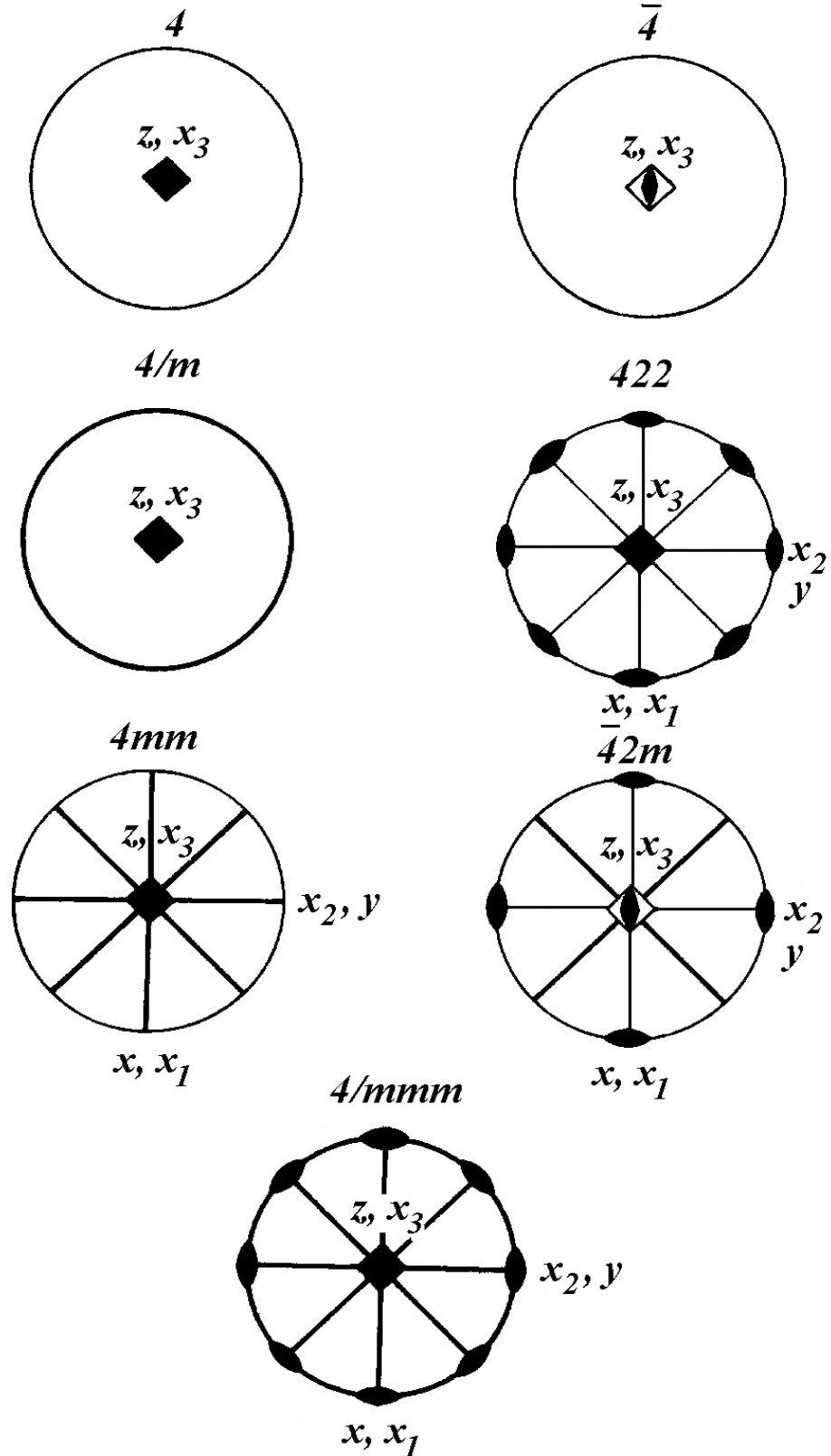
Моноклинная сингония



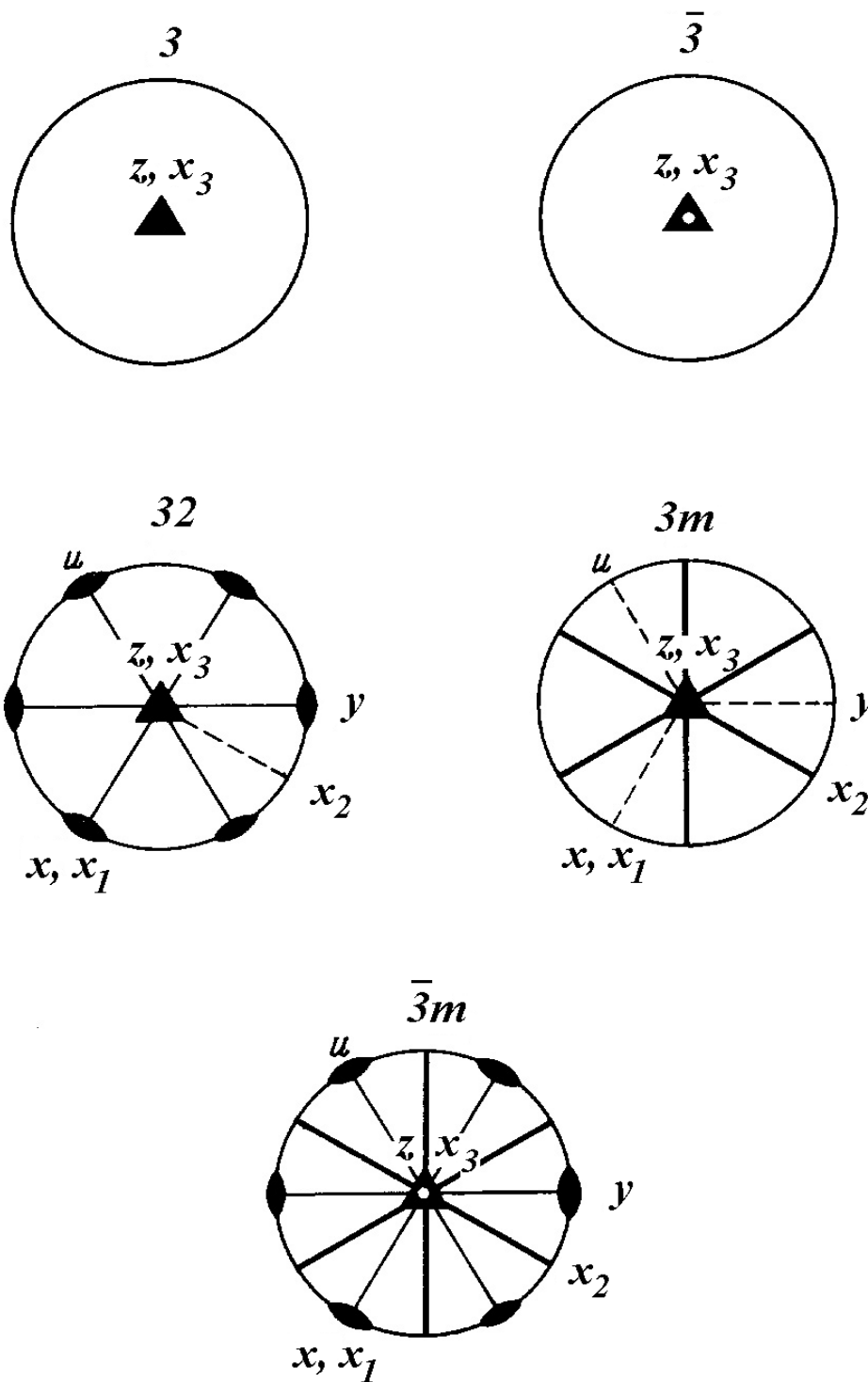
Ромбическая сингония



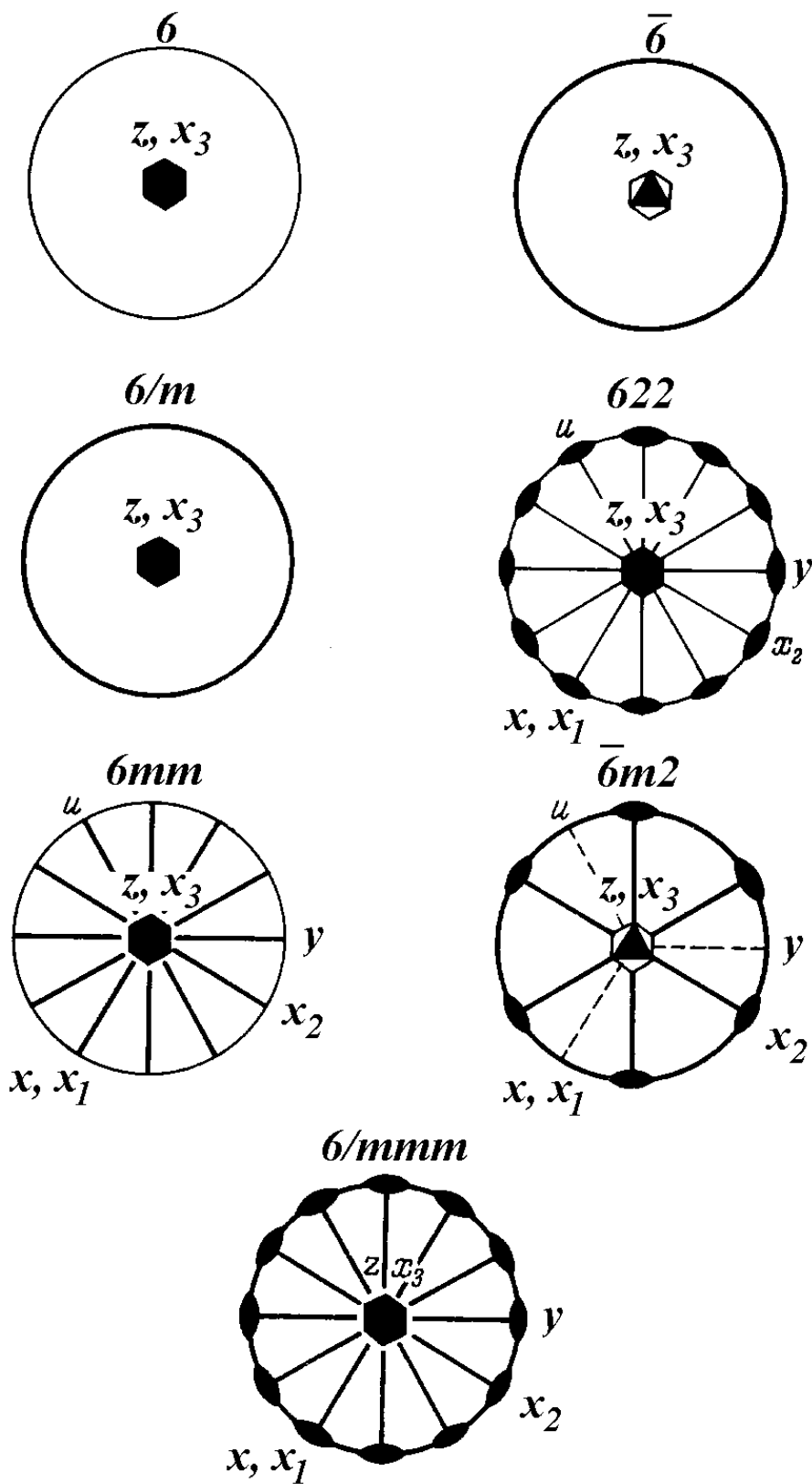
Тетрагональная сингония



Тригональная сингония



Гексагональная сингония



Кубическая сингония

